

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Emanuel Vieira dos Santos Junior

Construção e propriedades de uma família de  
hamiltonianos de Dirac auto-adjuntos no intervalo  
finito

São Cristóvão – SE

2019

Emanuel Vieira dos Santos Junior

Construção e propriedades de uma família de hamiltonianos de Dirac auto-adjuntos no  
intervalo finito

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao  
Curso de Graduação em Física da Universidade  
Federal de Sergipe, como requisito para obtenção  
do Grau de Bacharel em Física.

Aprovada em 13 de dezembro de 2019.

#### BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Andrei Smirnov - Orientador  
Universidade Federal de Sergipe - UFS

---

Prof. Stoian Ivanov Zlatev  
Universidade Federal de Sergipe - UFS

---

Prof. Emerson Luis De Santa Helena  
Universidade Federal de Sergipe - UFS

São Cristóvão – SE

2019

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por ter me dado saúde e determinação para superar as adversidades.

Agradeço ao meu orientador Andrei Smirnov pelo estímulo, apoio e dedicação durante esse período do trabalho de conclusão de curso.

Agradeço aos meus professores do Departamento de Física Stoian Ivanov Zlatev, Emerson Luis, Osmar de Souza, Nelson Orlando, Edvaldo Alves, Milan Lalic, pela excelência de qualidade de cada um

Agradeço aos meus professores do Departamento de Matemática Antônio Santos Silva, Bruno Luis, Naldisson dos Santos, Almir Rogério, pela excelência de qualidade de cada um.

Agradeço a minha família, meus pais Emanuel Vieira dos Santos e Maria Suely Sampaio Ferreira as minhas irmãs Emanuelle Ferreira dos Santos e Thaiane Ferreira Corbacho que sempre estão do meu lado me apoiando e me incentivando ao longo da minha jornada.

Agradeço aos meus amigos Gilvani Alves, Romel Costa, Pedro Nascimento, Mônica Sampaio, Aleff de Jesus, Bárbara Castelões, Thulio Constantino, Samuel Lucas, Lis Ramos, Alisson Max, Vitor Breno, Gabriel Borges, Lauro Oliveira, Jonathan Uendler, Luiza Miranda, Gustavo Henrique, Laura Costa, Liliane Martins, Douglas Santana, Rafael Ramos, Thiago Guimarães, Thyago Souza, que tiveram um papel especial ao longo de toda a graduação.

# Resumo

Este trabalho trata do estudo sobre o hamiltoniano de Dirac unidimensional no intervalo finito. Foi aplicado a teoria de von Neumann de extensões auto-adjuntas de operadores simétricos para determinar a existência de uma família quadri-paramétrica de extensões auto-adjuntas dos hamiltonianos de Dirac. Foi utilizado o formalismo AIM (Asorey, Ibort, Marmo) para determinar a forma explícita das condições de contorno e a construção da família dos hamiltonianos auto-adjuntos. Usando essas condições de contorno foi obtida a equação que define o espectro de energia da partícula e a forma explícita das autofunções para todos os membros da família quadri-paramétrica. Foi discutida a especificidade do problema que consiste na existência de estados com energia menor do que a energia de repouso, "edge states". Foi demonstrado graficamente a dependência da energia dos "edge states" para algumas classes bi-paramétricas da família. Para os conjuntos das autofunções dos hamiltonianos da família quadri-paramétrica foi demonstrada de forma explícita a relação de ortogonalidade e apresentado o esquema de prova da completeza dos conjuntos das autofunções.

Palavras-chave: Hamiltoniano de Dirac. Condições de contorno auto-adjuntas. Espectro. Completeza.

# Abstract

This work deals with the study of the one-dimensional Dirac Hamiltonian in a finite interval. Was applied von Neumann theory of self-adjoint extensions of symmetric operators to determine the existence of a four-parametric self-adjoint family of Dirac hamiltonians. For the construction of the self-adjoint hamiltonians of this family, was applied the AIM (Asorey, Ibort, Marmo) formalism where we explicitly determine the form of the boundary conditions. Using these boundary conditions we obtain the equation that defines the particle energy spectrum and the explicit form of the eigenfunctions for all the members of the four-parametric family. Was discussed the peculiarities of the problem that consists in the existence of the states with energy less than rest energy, edge states. Was graphically demonstrated the dependence of the energy of edge states for some bi-parametric classes of the family. For the sets of the eigenfunctions of the four-parametric family of hamiltonians, the orthogonality relationship was explicitly demonstrated and the scheme of the proof of completeness of the sets of the eigenfunctions was presented.

Keywords: Dirac Hamiltonian. Self-adjoint boundary conditions. Spectrum. Completeness.

# Lista de Figuras

3.1	Energia com valores menor da energia de repouso em dependência dos parâmetros $\theta$ e $\varphi$ . Ilustração do exemplo 1. . . . .	36
3.2	Energia com valores menor da energia de repouso em dependência dos parâmetros $\eta$ e $\varphi$ . Ilustração do exemplo 2. . . . .	36
3.3	Densidade de probabilidade $\rho(x)$ dos parâmetros $\rho = 1$ , $\theta = 0.75\pi$ , $\varphi = -0.75\pi$ , $q = 0.8$ . . . . .	39
3.4	Densidade de probabilidade $\rho(x)$ dos parâmetros $\rho = 0.9$ , $\theta = 0.75\pi$ , $\varphi = 0.5\pi$ , $\eta = 0.25\pi$ , $q = 0.8$ . . . . .	39

# Sumário

<b>Agradecimentos</b>	<b>iii</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>vi</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Operadores Lineares no Espaço de Hilbert</b>	<b>7</b>
2.1 Espaço de Hilbert . . . . .	7
2.2 Operadores Lineares . . . . .	11
2.3 Extensões Auto-Adjuntas de Operadores Simétricos . . . . .	14
2.3.1 Teoria de von Neumann . . . . .	15
2.3.2 Formalismo AIM . . . . .	16
<b>3 Hamiltoniano de Dirac Auto-Adjunto no Intervalo Finito</b>	<b>20</b>
3.1 Equação de Dirac . . . . .	21
3.2 Hamiltoniano de Dirac Unidimensional no Intervalo Finito . . . . .	23
3.2.1 Teoria de von Neumann . . . . .	24
3.2.2 Formalismo AIM . . . . .	28
3.3 As Propriedades da Família Quadri-Paramétrica dos Hamiltonianos de Dirac Auto-Adjuntos . . . . .	32
3.3.1 Equação do Espectro . . . . .	32
3.3.2 Forma Explícita das Autofunções . . . . .	37
3.3.3 Ortogonalidade do Conjunto das Autofunções . . . . .	40
3.3.4 Completeza do Conjunto das Autofunções . . . . .	43
<b>4 Conclusão</b>	<b>48</b>





# Capítulo 1

## Introdução

O desenvolvimento do formalismo da mecânica quântica pode ser colocado entre os anos de 1923 a 1927 pelos trabalhos de Werner Heisenberg e Max Born que propuseram inicialmente uma formulação matricial. Erwin Schrödinger propôs o formalismo da mecânica ondulatória e indicou que de fato essas duas formulações eram equivalentes. Ambas podem ser associadas por uma formulação mais geral da mecânica quântica que foi proposta no ano de 1930 por Dirac. Para um estudo mais detalhado da origem histórica e o desenvolvimento da teoria quântica, indicamos consultar a Ref. [1]. John von Neumann estabeleceu a teoria de operadores lineares no espaço de Hilbert [2] que é a descrição matemática rigorosa do formalismo de Dirac.

Por meio de diferentes tratamentos para construir a descrição quântica de sistemas físicos e a obtenção de uma interpretação adequada, a descrição do sistema quântico em termos de operadores geralmente é a ferramenta principal. No espaço de Hilbert os operadores auto-adjuntos que descrevem observáveis possuem autovalores reais e as autofunções associadas a autovalores distintos são ortogonais e formam um conjunto completo. Essas propriedades para quaisquer observáveis nos fornecem uma fundamentação para a interpretação probabilística da teoria quântica. No caso da dimensão finita, os operadores lineares são sempre limitados. Contudo, para aplicações na mecânica quântica, é necessário estudar operadores lineares que não são definidos em todo o espaço de Hilbert, mas sim em um domínio específico, o que só se torna possível no caso da dimensão infinita. Um mesmo operador linear aplicado em diferentes domínios determinam propriedades crucialmente diferentes e com a escolha apropriada do domínio a física de um determinado problema quântico em questão fica bem estabelecida. Quando estamos trabalhando com

operadores não limitados, é exigido que o domínio de tal operador seja denso no espaço e de maneira usual encontrada na literatura, tais operadores recebem o nome especial de operadores densamente definidos, Ref. [3].

Sabemos que a estruturação e discussão de um determinado sistema físico, em especial um sistema quântico, requer uma análise detalhada das suas condições de contorno que são impostas ao sistema. Tais condições de contorno usualmente são impostas pelo domínio onde está definido o operador linear que esteja associado a uma determinada quantidade física. Dependendo da escolha das condições de contorno, os resultados das quantidades físicas mensuráveis se alteram devido a variação no espectro de energia. Condições de contorno apropriadas nos dizem se um conjunto de autofunções constitui um conjunto completo ou não. Por exemplo, quando estamos interessados em expandir um determinado sistema quântico em um tempo inicial na base de autofunções obtidas em termos das condições de contorno do sistema, esse tipo de expansão é importante pois permite obter determinada probabilidade em produzir uma certa medida. A definição do operador auto-adjunto que descreve um observável inclui a formulação das condições de contorno.

Abordamos a seguir, alguns modelos físicos do ponto de vista da aplicação da teoria de operadores auto-adjuntos descritos na literatura e que nos serviram de motivação. O problema de Calogero, descrito nos trabalhos [4], [5], [6], é um problema quântico relacionado a uma partícula se movendo em uma dimensão sob a influência do potencial  $V(x) = \alpha x^{-2}$ , com uma singularidade na origem. O estudo desse tipo de potencial pode ser dividido em dois casos: quando  $\alpha > 0$  que corresponde a um potencial de repulsão, e o caso em que  $\alpha < 0$  que corresponde a um potencial de atração. Com o objetivo de descrever esse sistema e outros com potenciais singulares nestes trabalhos, foram discutidas inconsistências em relação ao parâmetro  $\alpha$  particulares ao tratamento quântico usual. A fim de solucionar tais inconsistências, foi necessário recorrer a um tratamento matemático mais rigoroso, por exemplo, na Ref. [7], o estudo foi restringido ao caso do movimento no semi eixo  $\mathbb{R}_+$ , os autores estudaram todas possíveis extensões auto-adjuntas, isto é, hamiltonianos auto-adjuntos associados ao hamiltoniano de Calogero. Os autores observaram uma quebra espontânea de simetria-escala associadas as extensões auto-adjuntas e também foi apresentada uma análise espectral completa dos hamiltonianos auto-adjuntos.

Outro exemplo deste contexto da equação de Schrödinger sujeita ao potencial

$V(x) = g_1 x^{-1} + g_2 x^{-2}$ ,  $x \in \mathbb{R}_+$ , singular na origem. O estudo desse potencial tem conexão com diferentes problemas físicos, por exemplo, para o caso onde  $g_2 > 0$  este tipo de potencial é usado para descrever a estrutura e energia molecular e as diferentes interações entre as moléculas, e recebe o nome especial de potencial de Kratzer, veja por exemplo, a Ref. [8]. No caso em que  $g_1 > 0$ ,  $g_2 > 0$ , este potencial descreve efeitos de tunelamento, dispersão de partículas carregadas e em particular, fluorescência e ionização molecular e recebe o nome de potencial de Kratzer inverso, como podemos ver nas Refs. [9], [10]. Ambos os casos foram separados em classes na Ref. [7], onde foram estudadas as possíveis extensões auto-adjuntas dos operadores associados e em cada classe foi determinada a equação do espectro de energia e que em ambas as classes as autofunções associadas formavam um sistema ortonormal completo no espaço de Hilbert apropriado.

O potencial do tipo  $V(x) = c^2[g_1 \sin^{-2}(cx) + g_2 \cos^{-2}(cx)]$ ,  $x \in [0, \pi/2c]$ , ficou conhecido como potencial de Poschl-Teller, introduzido pela Ref. [11], onde esse tipo de potencial recebeu destaque no estudo do modelo de vibração de um sistema molecular e foi capaz de descrever efeitos anarmônicos em processos de dissociação. Neste caso, utilizando a teoria de von Neumann, Gitman [7] foi capaz de separar os casos em classes e subclasses de extensões auto-adjuntas variando o intervalo do coeficiente  $g_2$ , considerando  $c > 0$ , tal que quando  $g_1 < \frac{1}{4}$  o espectro de energia da extensão associada coincidia com o problema de Calogero para  $\alpha = g_1$ . Além disso, foi notado que para quaisquer valores de  $g_1$  e  $g_2$  o limite de energias positivamente altas de forma assintótica coincidia com o espectro de energia de uma partícula livre não relativística de massa  $m = \frac{1}{2}$  em um poço quadrado infinito de comprimento  $l = \frac{\pi}{2c}$ .

Outro tipo de potencial dado por  $V(x) = 4c^2[g_1 \tan(h^2 cx) + g_2 \tan(hcx)]$ ,  $x \in \mathbb{R}$ , introduzido pela Ref. [12], ficou conhecido como potencial de Rosen-Morse e é aplicado na explicação dos níveis de energia vibracionais observados em moléculas poliatômicas. Sem perda de generalidade na Ref. [7] foi considerado o caso em que  $g_2 \geq 0$  e  $c > 0$ , e através da teoria de von Neumann, foi possível mostrar que o espectro de energia era simples quando  $E < 4c^2(g_1 + g_2)$  e duplamente degenerado quando  $E^2 \geq 4c^2(g_1 + g_2)$ .

Para descrever efeitos envolvendo todos os tipos fenômenos do tipo penetração de barreira, tunelamento, permeabilidade de barreira molecular, na Ref. [13] foi introduz o potencial de Eckhart, dado por  $V(x) = 4c^2[g_1 \coth^2(cx) + g_2 \coth(cx)]$ ,  $x \in \mathbb{R}_+$ . Aplicando a teoria de von Neumann a Ref. [7], considerou sem perda de generalidade o caso em que

$c > 0$ , e com isso foi descrito classes de extensões auto-adjuntas para diferentes valores de  $g_1$ , e observaram que para altas energias negativas, o espectro de energia coincidia de forma assintótica com o espectro obtido pelo modelo de Calogero quando  $\alpha = g_1$ .

Considerando o problema quântico de uma partícula de Dirac relativística se movendo sob influência do campo coulombiano de uma carga pontual  $Ze$ , pode ser visto na Ref. [14] que a descrição desse sistema não existe para valores de cargas excedendo a chamada carga crítica  $Z \leq Z_c = \alpha^{-1} = 137$ . Nos trabalhos [15], [16], [17] a equação de Dirac com campo de Coulomb para  $Z > Z_c$  foi considerada inconsistente e sem significado físico. Baseando-se nos métodos da teoria de extensões auto-adjuntas de operadores simétricos e o método de Krein de "guiding functionals", na Ref. [18] foi mostrado que do ponto de vista matemático a definição de operadores de Dirac auto-adjuntos para um valor de  $Z$  arbitrário não apresentava problemas. Contudo, para  $Z > Z_s = (\sqrt{3}/2)\alpha^{-1} \approx 118$  existe uma característica específica das cargas supercríticas devido a não unicidade dos hamiltonianos de Dirac auto-adjuntos, e existe uma família de extensões auto adjuntas parametrizadas por um número finito de parâmetros extras e especificado por condições de contorno adicionais na origem. A existência desses parâmetros é uma manifestação da possibilidade da situação física não trivial na vizinhança de cargas super críticas. Um espectro real e um conjunto completo de autofunções pode ser determinado para cada hamiltoniano, tal que a mecânica quântica relativística para o elétron no campo coulombiano super crítico pode ser construída.

Outro fenômeno físico que necessita o envolvimento da teoria de operadores auto-adjuntos é o efeito de Aharonov-Bohm (AB). O efeito AB revela um status peculiar de potenciais eletromagnéticos na teoria quântica, descrito nas Refs. [19], [20], [21]. Uma dispersão de partículas não trivial pelo campo AB foi interpretada como a capacidade de uma partícula quântica "sentir" o potencial vetorial do campo eletromagnético por causa do potencial vetorial do campo AB não se anular fora do solenoide. Uma divisão dos níveis de Landau em uma superposição do campo AB e um campo magnético uniforme paralelo fornece exemplo do efeito AB para estados ligados. Essa superposição é chamada de campo magnético-solenoidal. A equação de Dirac com o campo magnético-solenoidal e descrição do hamiltoniano de Dirac com esse campo foi discutido nos trabalhos [22], [23], [24], [25] com o uso da teoria de operadores auto-adjuntos. No trabalho [26], utilizando a teoria de von Neumann de extensões auto-adjuntas de operadores simétricos e o método de

Krein para "guiding functionals", foram estudados todos os hamiltonianos auto-adjuntos de Schrödinger e Dirac, ambos com um campo puro de AB e um campo magnético-solenoidal. Para esses hamiltonianos foi feita a análise espectral completa que incluiu o espectro, a decomposição espectral e fórmulas de inversão. A descrição do problema no idioma português pode ser encontrada na Ref. [27]. Na descrição dos problemas da física planar e no efeito Hall quântico, veja por exemplo as Refs. [28], [29], [30], é utilizado a superposição dos campos magnéticos e AB.

Essa monografia tem como ponto de referência principal o problema da partícula de Dirac "livre" em uma caixa unidimensional [31]. Neste trabalho foi obtida uma família quadri-paramétrica de extensões auto-adjuntas do hamiltoniano de Dirac com o uso da teoria de von Neumann e em seguida foram estabelecidas as condições de contorno para as funções dos domínios dos hamiltonianos. Também foi considerado o limite não relativístico onde os autores obtiveram três famílias de extensões para o hamiltoniano "livre" não relativístico.

Descrevemos os metodos de construção de operadores auto-adjuntos que são principalmente aplicados nos problemas físicos. Teoria de von Neumann de extensões auto-adjuntas de operadores simétricos. A descrição desse método pode ser encontrada nos livros [32], [33], [34]. No idioma português e de forma mais pedagógica pode ser encontrado na Ref. [3]. Na linguagem mais moderna o método é descrito na Ref. [7]. Outro método recebeu o nome na literatura de formalismo AIM em alusão aos autores Asorey, Ibort, Marmo, Ref. [38]. Esse método é elaborado para os operadores de Laplace-Beltrami na variedade Riemanniana  $n$ -dimensional com suporte compacto e fronteira suave, sob a ação de um potencial. Para o caso do hamiltoniano de Dirac o formalismo AIM também é elaborado e pode ser encontrado na Ref. [39]. Outro método para a construção de operadores auto-adjuntos é o método da forma de assimetria. Esse método é descrito na Ref. [7] no Cap. 4, Seq. 7. O método é baseado a partir de um operador simétrico a partir do qual se determina o adjunto associado e então de forma recursiva o operador auto-adjunto é determinado pela coincidência dos domínios dos operadores.

Uma propriedade dos operadores auto-adjuntos é a completeza do conjunto das suas autofunções. A prova da completeza dos operadores auto-adjuntos é um problema bastante difícil e atualmente não existe um método comum que pode ser utilizado para qualquer operador auto-adjunto. Para cada operador deve ser elaborado o proprio método.

O método da prova de completeza que foi aplicado nos modelos descritos nos parágrafos anteriores é o método de Krein de "guiding functionals" que é descrito na Ref. [7], Cap. 5, Seq. 3. Existem outros métodos da prova de completeza apresentados nas Refs. [33], [35], [36], [37]. O método descrito nas Refs. [35], [36], pode ser apropriadamente aplicado para o operador de Schrödinger unidimensional no intervalo finito com as condições de contorno separadas. Na Ref. [40] é apresentado um método que pode ser aplicado para o operador de Schrödinger no intervalo finito com as condições de contorno não separadas e indicado o esquema da prova da completeza do conjunto de autofunções da equação de Dirac. Esta metodologia para a equação de Dirac será utilizada na monografia.

Na monografia, discutimos o hamiltoniano de Dirac unidimensional no intervalo finito e revisamos os resultados do trabalho [31]. Apresentamos explicitamente, utilizando a teoria de von Neumann, que existe uma família quadri-paramétrica de extensões auto-adjuntas do hamiltoniano de Dirac unidimensional no intervalo finito. Para construir os hamiltonianos auto-adjuntos da família quadri-paramétrica iremos aplicar o formalismo AIM para o caso spinorial desenvolvido no trabalho [39] e formulamos explicitamente as condições de contorno para as funções dos domínios. O resultado obtido é comparado com o resultado do trabalho [31]. A partir das condições de contorno auto-adjuntas, encontramos a equação que define o espectro de energia da partícula e a forma explícita das autofunções para todos os membros da família quadri-paramétrica. É descrita as propriedades específicas dos espectros e discutida a especificidade do problema que consiste na existência dos estados com energia menor da energia de repouso:  $0 < E < mc^2$ . É demonstrada graficamente a dependência da energia dos parâmetros da família quadri-paramétrica para algumas classes bi-paramétricos da família. Para esses estados com energia menor do que a energia de repouso foi determinada a densidade de probabilidade e demonstrado graficamente o comportamento das partículas nesses estados denominados "edge states". É demonstrada explicitamente a ortogonalidade das autofunções dos hamiltonianos da família. Finalmente é apresentada o esquema da completeza dos conjuntos das autofunções dos hamiltonianos da família.

## Capítulo 2

# Operadores Lineares no Espaço de Hilbert

Neste capítulo, vamos abordar alguns resultados e propriedades básicas de operadores lineares no espaço de Hilbert, que serão relevantes para os propositos neste trabalho. Para descrever este assunto utilizamos os textos das Refs. [3], [7], para um aprofundamento mais detalhado de diversos conceitos e resultados que serão utilizados no decorrer do capítulo.

### 2.1 Espaço de Hilbert

**Definição 2.1.1.** *Um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  é um espaço linear sobre um corpo  $\mathbb{K}$  munido de produto interno  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  tal que  $\mathcal{H}$  é completo com respeito a norma  $\| \cdot \|_{\mathcal{H}} = \sqrt{\langle \cdot, \cdot \rangle}$  induzida pelo produto interno.*

Como um dos postulados da mecânica quântica, um sistema quântico é descrito por um espaço de Hilbert complexo, ou seja, quando  $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ . Um produto interno complexo em  $\mathcal{H}$ , é um mapa linear  $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$  que satisfaz as seguintes propriedades para todo  $\varphi, \psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$  e  $z \in \mathbb{C}$ :

$$(i) \quad \langle \varphi, \psi \rangle = \overline{\langle \psi, \varphi \rangle} \quad (\text{conjugado simétrico})$$

$$(ii) \quad \langle \varphi, z\psi_1 + \psi_2 \rangle = z\langle \varphi, \psi_1 \rangle + \langle \varphi, \psi_2 \rangle \quad (\text{linearidade no segundo argumento})$$

$$(iii) \quad \langle \varphi, \varphi \rangle \geq 0 \text{ e } \langle \varphi, \varphi \rangle = 0 \Leftrightarrow \varphi = 0_{\mathcal{H}}. \quad (\text{positivo definido})$$

Além disso,  $\mathcal{H}$  é um espaço métrico completo com respeito a métrica induzida pela norma induzida pelo produto interno  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ . Explicitamente, para cada sequência  $\psi : \mathbb{N} \rightarrow \mathcal{H}$  que satisfaz a propriedade de Cauchy, isto é, para todo  $\epsilon > 0$ , existe um  $N \in \mathbb{N}$  tal que

$$\|\psi_n - \psi_m\| < \epsilon, \quad \forall n, m \geq N, \quad (2.1.1)$$

onde  $\psi_n := \psi(n)$  e  $\|\psi\| := \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle}$ , então a sequência converge em  $\mathcal{H}$ , ou seja, existe um elemento em  $\mathcal{H}$ , digamos  $\psi$ , onde para todo  $\epsilon > 0$ , existe um  $N \in \mathbb{N}$  tal que

$$\|\psi - \psi_n\| < \epsilon, \quad \forall n \geq N. \quad (2.1.2)$$

Iremos trabalhar com o espaço de Hilbert de dimensão infinita. Entretanto indicamos que em alguns textos da física matemática os espaços de dimensão finita também são chamados de espaços de Hilbert, [3].

Muitas vezes estaremos interessados em tratar sobre subespaços lineares de um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ , isto é, subconjuntos  $M \subseteq \mathcal{H}$  tal que

$$\forall \varphi, \psi \in M : \forall z \in \mathbb{C} : z\varphi + \psi \in M,$$

onde é importante destacar o fato de que enquanto todo subespaço linear  $M \subset \mathcal{H}$  herda o produto interno em  $\mathcal{H}$  ele pode falhar em ser completo em relação ao produto interno.

Vejamos a seguir algumas noções topológicas e geométricas básicas e de extrema importância sobre  $\mathcal{H}$ . Uma bola aberta de centro  $\varphi_0$  e raio  $\epsilon$ , ou uma  $\epsilon$ -vizinhança de um ponto  $\varphi_0$  é definida por  $B_\epsilon(\varphi_0) := \{\varphi_0 \in \mathcal{H} \mid \|\varphi - \varphi_0\| < \epsilon\}$ . Um conjunto  $M \subset \mathcal{H}$  é dito limitado quando ele está contido em alguma bola, digamos,  $M \subset B_\eta(0)$  para algum  $\eta > 0$ . Com posse da noção preliminar de bola, podemos caracterizarmos conjuntos abertos e fechados em  $\mathcal{H}$ .

**Definição 2.1.2.** *Seja  $\varphi \in M \subset \mathcal{H}$ . Dizemos que  $\varphi$  é um ponto interior do conjunto  $M$  quando, para algum  $\epsilon > 0$ , todos os pontos suficientemente próximos de  $\varphi$  também pertencem a  $M$ , ou, em termos de bola, tem-se que  $B(\varphi; \epsilon) \subset M$ .*

O interior de  $M$ , denotado por,  $\text{int } M$  é o conjunto dos pontos interiores a  $M$ . Dizemos que o conjunto  $M$  é aberto se todos os seus pontos são pontos interiores, ou seja, quando  $M = \text{int } M$ .

**Definição 2.1.3.** *Um elemento  $\varphi$  é chamado de ponto aderente de um subconjunto  $M \in \mathcal{H}$  se em qualquer vizinhança de  $\varphi$ , existe um número infinito de pontos pertencendo a  $M$ .*



Ou de forma equivalente, um vetor  $\varphi$  é um ponto aderente de um conjunto  $M$  se existe uma sequência  $\{\varphi_n\}_1^\infty$ ,  $\varphi_n \in M$ , tal que  $\varphi = \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n$ . Assim, o conjunto  $M$  é dito fechado se ele contém todos os seus pontos aderentes, que é denotado por  $M = \overline{M}$ .

Qualquer conjunto  $M \subset \mathcal{H}$  pode ser fechado adicionando todos os seus pontos aderentes. Chamamos essa operação de operação de *fecho* e denotamos o *fecho* de um conjunto  $M$  por  $\overline{M}$ . Evidentemente  $M \subseteq \overline{M}$ . A igualdade é válida se  $M$  for um conjunto fechado, e  $\overline{M}$  é o menor conjunto fechado contendo  $M$ . Um conjunto  $M \subset \mathcal{H}$  é dito ser *denso* em  $\mathcal{H}$  se  $\overline{M} = \mathcal{H}$ , isto é, se o seu fecho coincide com todo o espaço. O espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  é dito *separável* se ele contém um subconjunto contável denso.

Dois vetores  $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$  são ditos *ortogonais*, se  $\langle \varphi, \psi \rangle = 0$ , e denota-se por  $\varphi \perp \psi$ . Uma coleção  $\{\varphi_n\}$  de vetores em  $\mathcal{H}$  é chamado de *conjunto ortonormal* se  $\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$ , onde  $\delta_{ij}$  é o símbolo do delta de Kronecker. Se  $S$  é um conjunto ortonormal em um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  e nenhum outro conjunto ortonormal contém  $S$  como um subconjunto próprio, então  $S$  é chamado de *base ortonormal* de  $\mathcal{H}$ . Todo espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  possui uma base ortonormal, que pode ser finita, infinitamente contável, ou não contável. Assim como em espaços vetoriais de dimensão finita, qualquer elemento de um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ , pode ser expresso como combinação linear (possivelmente infinita) dos elementos da base, isto é, se denotarmos  $S = \{\varphi_m\}_{m \in M}$  como sendo uma base ortonormal, onde  $M$  se refere a um conjunto contável, então  $\forall \psi \in \mathcal{H} : \psi = \sum_{m \in M} c_m \varphi_m$ , com  $c_m = \langle \varphi_m, \psi \rangle$ .

**Definição 2.1.4.** *Seja  $M \subset \mathcal{H}$  um subconjunto do espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ . Definimos o seu complemento ortogonal pelo subespaço fechado*

$$M^\perp := \{\varphi \in \mathcal{H} \mid \langle \varphi, \psi \rangle = 0, \forall \psi \in M\}. \quad (2.1.3)$$

O complemento ortogonal  $M^\perp$  consiste de todos os vetores que são ortogonais a todos os elementos de  $M$ . Para um subespaço fechado  $M \subset \mathcal{H}$  sempre vale a decomposição em soma direta ortogonal  $\mathcal{H} = M \oplus M^\perp$ . Ou seja, qualquer vetor  $\varphi \in \mathcal{H}$  é unicamente representado por  $\varphi = \varphi_\parallel + \varphi_\perp$ , onde,  $\varphi_\parallel \in M$ ,  $\varphi_\perp \in M^\perp$  e  $\langle \varphi_\parallel, \varphi_\perp \rangle = 0$ . O vetor  $\varphi_\parallel$  usualmente chama-se projeção de  $\varphi$  em  $M$ .

O exemplo mais importante de um espaço de Hilbert de dimensão infinita para os propósitos neste trabalho é o chamado espaço de Hilbert  $L^2$ . Na Mecânica Quântica, denotamos o espaço de Hilbert  $L^2(a, b)$  como sendo o espaço dos estados de uma partícula que se move em um intervalo finito  $(a, b)$  do eixo real.

**Definição 2.1.5.** O espaço de Hilbert  $L^2(a, b)$  é o espaço vetorial linear das funções quadrado-integráveis no intervalo  $(a, b)$  :

$$L^2(a, b) = \{f(x) : \int_a^b dx |f(x)|^2 < \infty\},$$

munido do produto interno e norma induzida pelo produto interno definidos respectivamente por

$$\langle f, g \rangle := \int_a^b dx \overline{f(x)} g(x), \quad ||f|| := \sqrt{\int_a^b dx |f(x)|^2},$$

onde a barra em cima de  $f$  denota a conjugação complexa.

A norma neste espaço recebe o nome especial de norma- $L^2$  devido a completeza desse espaço induzir uma nova classe de convergência para conjuntos infinitos de funções, chamada de convergência da média. Quando  $f(x)$  e  $g(x)$  convergem nesse sentido, é convencional dizermos que  $f(x)$  é igual a  $g(x)$  "em quase todos os lugares".

Considere um conjunto de funções quadrado-integráveis  $\{\psi_j\}$  que são ortonormais na norma- $L^2$ . Os números

$$c_k = \langle f, \psi_k \rangle, \quad (2.1.4)$$

são chamados coeficientes de Fourier da função  $f \in L^2$  relativo ao conjunto ortonormal  $\{\psi_j\}$ , e a série

$$\sum_{k=1}^{\infty} c_k \psi_k, \quad (2.1.5)$$

é chamada série de Fourier de  $f$  com respeito ao conjunto  $\{\psi_j\}$ .

**Teorema 2.1.1.** Dado qualquer conjunto de números complexos  $(c_i)$  tal que

$$\sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 < \infty \quad (2.1.6)$$

existe uma função  $f \in L^2$  tal que

$$c_k = \langle f, \psi_k \rangle \quad e \quad \sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 = ||f||^2, \quad (2.1.7)$$

onde  $\{\psi_k\}$  é um conjunto ortonormal completo.

*Demonstração.* Defina a combinação linear de  $\psi_k$  por

$$f_n(x) = \sum_{k=1}^n c_k \psi_k \quad (2.1.8)$$

onde os  $c_k$  são números complexos arbitrários satisfazendo a condição (2.1.6). Então, para um dado inteiro  $p \geq 1$ , obtemos

$$\|f_{n+p} - f_n\|^2 = \|c_{n+1}\psi_{k+1} + \cdots + c_{n+p}\psi_{n+p}\|^2 = \sum_{k=n+1}^{n+p} |c_k|^2. \quad (2.1.9)$$

Façamos  $p = 1$  e  $n \rightarrow \infty$ . Então, devido a condição (2.1.6), segue que

$$\|f_{n+1} - f_n\|^2 = |c_{n+1}|^2 \rightarrow 0. \quad (n \rightarrow \infty) \quad (2.1.10)$$

isso nos diz que a sequência infinita  $f_n$  definida por (2.1.8) sempre converge na norma- $L^2$  para a função  $f \in L^2$ . Resta mostrarmos que essa função limite  $f$  satisfaz a condição (2.1.7). Considere o produto interno:

$$\langle f, \psi_i \rangle = \langle f_n, \psi_i \rangle + \langle f - f_n, \psi_i \rangle, \quad (2.1.11)$$

onde assumimos  $n \geq 1$ . Segue da Eq. (2.1.8) que o primeiro termo do lado direito é igual a  $c_i$ . O segundo termo se anula quando  $n \rightarrow \infty$ , uma vez que

$$|\langle f - f_n, \psi_i \rangle| \leq \|f - f_n\| \|\psi_i\| \rightarrow 0, \quad (n \rightarrow \infty) \quad (2.1.12)$$

onde obviamente usamos a propriedade da convergência de  $f_n$  para  $f$  no sentido da média. Além disso, o lado esquerdo da Eq. (2.1.11) é independente de  $n$ . Consequentemente, tomando o limite quando  $n \rightarrow \infty$  em ambos os lados da Eq. (2.1.11), obtemos

$$\langle f, \psi_i \rangle = c_i. \quad (2.1.13)$$

Ou seja,  $c_i$  é o coeficiente de Fourier da função  $f$  relativa a base  $\psi_i$ . Por hipótese, o conjunto  $\{\psi_i\}$  é um conjunto ortonormal completo. Logo, os coeficientes de Fourier (2.1.4) satisfazem a identidade de Parseval:

$$\sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 = \|f\|^2. \quad (2.1.14)$$

Os resultados em (2.1.13) e (2.1.14) são idênticos a condição (2.1.7), e portanto o teorema está provado.  $\square$

## 2.2 Operadores Lineares

Um operador  $T : \mathcal{D}_T \rightarrow \mathcal{H}$ , onde  $\mathcal{D}_T \subseteq \mathcal{H}$  é chamado domínio de  $T$ , é dito *linear* se para todo  $\varphi, \psi \in \mathcal{D}_T$ , e para todo  $z \in \mathbb{C}$ , é valido que  $T(z\varphi + \psi) = zT\varphi + T\psi$ . Define-se

o núcleo e a imagem de um operador linear  $T$  respectivamente por :  $\text{Ker } T := \{T\varphi = 0 \mid \varphi \in \mathcal{D}_T\}$ ,  $\text{Im}(T) := \{T\varphi \mid \varphi \in \mathcal{D}_T\}$ . Vale ressaltar que um operador  $T : \mathcal{D}_T \rightarrow \mathcal{H}$  é *injetivo* se, e somente se,  $\text{ker}(T) = 0$ , e *sobrejetivo* se, e somente se  $\text{Im}(T) = \mathcal{H}$ .

**Definição 2.2.1.** *Seja  $\mathcal{H}$  um espaço de Hilbert. Um operador linear  $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é dito limitado se existe uma constante  $C \geq 0$  tal que*

$$\|T\varphi\| \leq C\|\varphi\|, \quad \forall \varphi \in \mathcal{H}. \quad (2.2.1)$$

A menor constante  $M$  tal que a equação acima vale, é chamada *norma* do operador  $T$  e é denotada por  $\|T\|$ . O espaço de todos os operadores lineares limitados atuando em  $\mathcal{H}$ , é denotado por  $\mathcal{BH}$ .

**Definição 2.2.2.** *Seja  $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  um operador linear limitado em  $\mathcal{H}$ . O operador  $T^\dagger$ , chamado de operador adjunto de  $T$ , é definido por*

$$\langle \psi, T^\dagger \varphi \rangle := \langle T\psi, \varphi \rangle, \quad \forall \psi, \varphi \in \mathcal{H}. \quad (2.2.2)$$

Quando o operador  $T^\dagger = T$  ou, equivalentemente, se

$$\langle \psi, T\varphi \rangle := \langle T\psi, \varphi \rangle, \quad \forall \psi, \varphi \in \mathcal{H}, \quad (2.2.3)$$

dizemos que  $T$  é *auto-adjunto*.

Vejamos dois exemplos importantes sobre operadores limitados.

**Exemplo 2.2.1.** *Seja  $\mathcal{H}$  um espaço de Hilbert. Um operador linear limitado  $U \in \mathcal{BH}$  é chamado de operador unitário se*

$$\|U\psi\| = \|\psi\|, \quad \forall \psi \in \mathcal{H}, \quad \langle U\psi, U\varphi \rangle = \langle \psi, \varphi \rangle, \quad \forall \psi, \varphi \in \mathcal{H}. \quad (2.2.4)$$

**Exemplo 2.2.2.** *Seja  $\mathcal{H}$  um espaço de Hilbert. Um operador integral  $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é um operador da forma*

$$Tf(x) = \int_{\mathcal{H}} dt K(x, t) f(t) \quad (2.2.5)$$

onde,  $K(x, t)$  é denominado núcleo do operador  $T$ . Se o núcleo  $K(x, t)$  é quadrado-integrável então o operador  $T$  é limitado e é denominado operador integral de Hilbert-Schmidt. Neste caso, a norma do operador  $T$  satisfaz a desigualdade  $\|T\| \leq \|K\|$ , onde escolhe-se  $K \in L^2(\mathcal{H} \times \mathcal{H})$  tal que  $\|K\| = \int_{\mathcal{H}} \int_{\mathcal{H}} dt ds |K(t, s)|^2 < \infty$ .

**Definição 2.2.3.** Dizemos que um operador linear  $T : \mathcal{D}_T \rightarrow \mathcal{H}$  é densamente definido se o domínio de  $T$ ,  $\mathcal{D}_T$ , é denso em  $\mathcal{H}$ . Em outras palavras, para todo  $\epsilon > 0$  e para todo  $\psi \in \mathcal{H}$  existe um  $\zeta \in \mathcal{D}_T$  tal que  $\|\zeta - \psi\| < \epsilon$ . De forma equivalente,  $\overline{\mathcal{D}_T} = \mathcal{H}$ , isto é, para cada  $\psi \in \mathcal{H}$  existe uma sequência  $\{\zeta_n\}_{n \in \mathbb{N}}$  no domínio  $\mathcal{D}_T$  cujo limite é  $\psi$ .

**Definição 2.2.4.** Um operador  $T : \mathcal{D}_T \rightarrow \mathcal{H}$  densamente definido em  $\mathcal{H}$  é dito simétrico se

$$\forall \psi, \varphi \in \mathcal{D}_T : \langle \psi, T\varphi \rangle = \langle T\psi, \varphi \rangle. \quad (2.2.6)$$

Um propriedade extremamente importante sobre operadores simétricos, é que todos os seus autovalores são reais. Com efeito, seja  $\psi \in \mathcal{D}_T$  com  $\psi \neq 0$ , um autovetor de um operador  $T$  densamente definido e simétrico, isto é,  $T\psi = \lambda\psi$ , para algum número complexo  $\lambda$ , onde  $\lambda$  é chamado de autovalor do operador  $T$ . Então, por definição

$$\langle \psi, T\psi \rangle = \langle T\psi, \psi \rangle \Leftrightarrow \langle \psi, \lambda\psi \rangle = \langle \lambda\psi, \psi \rangle \Leftrightarrow \bar{\lambda}\langle \psi, \psi \rangle = \lambda\langle \psi, \psi \rangle \Leftrightarrow (\bar{\lambda} - \lambda)\langle \psi, \psi \rangle = 0. \quad (2.2.7)$$

Como  $\psi \neq 0$ , segue que  $\bar{\lambda} = \lambda$ , e portanto,  $\lambda$  é real. Outra propriedade importante sobre operadores simétricos, é que autofunções associados a autovalores distintos são ortogonais. De fato, considere  $T$  um operador simétrico densamente definido, e as equações de autovalores  $T\psi = \lambda\psi$ ,  $T\varphi = \mu\varphi$ , onde  $\psi, \varphi \in \mathcal{D}_T$ , e  $\mu, \lambda \in \mathbb{R}, \mu \neq \lambda$ . Então, por definição

$$\langle \psi, T\varphi \rangle = \langle T\psi, \varphi \rangle \Leftrightarrow \langle \psi, \mu\varphi \rangle = \langle \lambda\psi, \varphi \rangle \Leftrightarrow \mu\langle \psi, \varphi \rangle = \lambda\langle \psi, \varphi \rangle \Leftrightarrow (\mu - \lambda)\langle \psi, \varphi \rangle = 0. \quad (2.2.8)$$

Como por hipótese  $\mu \neq \lambda$ , segue que  $\langle \psi, \varphi \rangle = 0$ . Logo,  $\psi \perp \varphi$ .

**Definição 2.2.5.** Seja  $T : \mathcal{D}_T \rightarrow \mathcal{H}$  um operador densamente definido em  $\mathcal{H}$ . O adjunto de  $T$ , é o operador  $T^\dagger : \mathcal{D}_{T^\dagger} \rightarrow \mathcal{H}$  definido por

- $\mathcal{D}_{T^\dagger} := \{\psi \in \mathcal{H} \mid \exists \eta \in \mathcal{H} : \forall \zeta \in \mathcal{D}_T : \langle \psi, T\zeta \rangle = \langle \eta, \zeta \rangle\}$ .
- $T^\dagger\psi := \eta$ .

Quando,  $\mathcal{D}_{T^\dagger} = \mathcal{D}_T$  e  $T^\dagger = T$ , dizemos que  $T$  é auto-adjunto. A coincidência nos domínios  $\mathcal{D}_{T^\dagger}$  e  $\mathcal{D}_T$  é essencial, e o domínio de um operador auto-adjunto é também denso em  $\mathcal{H}$ .

**Lema 2.2.1.** Seja  $T : \mathcal{D}_T \rightarrow \mathcal{H}$  um operador não limitado densamente definido em  $\mathcal{H}$ . Então,

$$\text{Ker } T^\dagger = \text{Im}(T)^\perp. \quad (2.2.9)$$

*Demonstração.* Suponha que  $\psi \in \text{Ker } T^\dagger$ . Então, para todo  $\varphi = T\psi \in \text{Im } T$  temos que

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \langle \psi, T\psi \rangle = \langle T^\dagger \psi, \psi \rangle = 0. \quad (2.2.10)$$

Logo,  $\psi \in \text{Im}(T)^\perp$ . Reciprocamente, suponha que  $\psi \in \text{Im}(T)^\perp$ . Então, para todo  $\varphi \in \mathcal{D}_T$  vale a identidade  $\langle \psi, T\varphi \rangle = 0$ . Ou seja,  $\psi \in \mathcal{D}_{T^\dagger}$  e  $T^\dagger \psi = 0$ . Portanto,  $\psi \in \text{Ker } T^\dagger$ .  $\square$

Observe que todo operador auto-adjunto é simétrico, mas um operador simétrico não é necessariamente auto-adjunto. Geralmente, não há dificuldade em verificar se um operador é simétrico. Por outro lado, verificar se um operador é auto-adjunto diretamente da definição requer a construção do seu adjunto associado, o que nem sempre é um trabalho simples. No entanto, como todo operador auto-adjunto é simétrico, podemos verificar primeiro a sua propriedade de ser simétrico, e então determinar critérios para quando um operador simétrico é auto-adjunto, ou quando existem extensões auto-adjuntas. Duas complicações sobre extensões de operadores é que, dado um operador simétrico ele pode não ter extensões auto-adjuntas, ou ele pode ter varias diferentes extensões auto-adjuntas.

## 2.3 Extensões Auto-Adjuntas de Operadores Simétricos

Em geral, pode ser difícil escrever explicitamente o domínio de um operador auto-adjunto. Por exemplo, esse tipo de situação surge na mecânica quântica, quando estamos estudando o hamiltoniano de um sistema para um determinado potencial. Então como procedimento padrão, definimos o domínio do hamiltoniano em algum domínio denso, como por exemplo, no caso de uma partícula se movendo em um intervalo finito, assumimos inicialmente o domínio sendo o domínio de funções suaves com suporte compacto. Depois disso, verificamos se esse operador simétrico possui extensões auto-adjuntas. Onde para descrever essas extensões auto-adjuntas de operadores simétricos, utilizaremos o formalismo de von Neumann em termos dos subespaços e índices de deficiência, que pode ser encontrado de forma detalhada na Ref. [7], e o formalismo AIM que foi desenvolvido na Ref. [38], que é equivalente a caracterização de von Neumann, contudo é mais útil para descrever as aplicações físicas por ser formulado puramente em termos dos valores de contorno do problema.

### 2.3.1 Teoria de von Neumann

**Definição 2.3.1.** *Seja  $T : \mathcal{D}_T \rightarrow \mathcal{H}$  um operador simétrico densamente definido em  $\mathcal{H}$ . Os subespaços  $\mathcal{K}_\pm$  chamados de subespaços de deficiência do operador  $T$  são definidos por*

$$\mathcal{K}_\pm := \text{Ker}(T^\dagger \mp i\kappa) = \text{Im}(T^\dagger \pm i\kappa)^\perp \quad (2.3.1)$$

*ou equivalentemente,*

$$\mathcal{K}_\pm := \{\psi \in \mathcal{D}_{T^\dagger} \mid (T^\dagger \mp i\kappa)\psi = 0\}. \quad (2.3.2)$$

*onde  $\kappa$  é uma constante arbitrária positiva necessária por razões dimensionais. As dimensões dos subespaços de deficiência,*

$$n_\pm := \dim(\mathcal{K}_\pm) \quad (2.3.3)$$

*recebem o nome especial de índices de deficiência do operador  $T$ . Os índices de deficiência podem ser números inteiros arbitrários e possivelmente até podem ser infinitos.*

Para caracterizar e construir precisamente quais condições um operador simétrico deve possuir para admitir extensões auto-adjuntas, surge então o teorema de von Neumann, ou também chamado de *teorema principal* de acordo com a Ref. [7].

**Teorema 2.3.1.** *Considere  $T : \mathcal{D}_T \rightarrow \mathcal{H}$  um operador simétrico densamente definido em  $\mathcal{H}$ , e adjunto associado  $T^\dagger : \mathcal{D}_{T^\dagger} \rightarrow \mathcal{H}$ ,  $T \subseteq T^\dagger$ . Então, o operador  $T$  possui extensões auto-adjuntas  $T_U = T_U^\dagger$ ,  $T \subseteq T_U$  se, e somente se seus subespaços de deficiência associados  $\mathcal{K}_\pm$  são isomorfos, ou se, e somente se seus índices de deficiência são iguais  $n_\pm = n$ .*

*Se os subespaços de deficiência são triviais, isto é, se ambos os índices de deficiência são iguais a zero,  $n_\pm = 0$ , o operador  $T$  é essencialmente auto-adjunto, e sua única extensão auto-adjunta é o seu fecho  $\bar{T} = (T^\dagger)^\dagger$ , que coincide com seu adjunto,  $\bar{T} = (\bar{T})^\dagger = T^\dagger$ .*

*Se os subespaços de deficiência são não triviais, isto é, se os índices de deficiência são diferentes de zero,  $n_\pm = n \neq 0$ , então existe uma família  $n^2$ -paramétrica  $\{T_U\}$  de extensões auto-adjuntas que é a variedade  $U(n)$ , um grupo unitário.*

*Cada extensão auto-adjunta  $T_U$  é determinada por um operador unitário  $U : \mathcal{K}_+ \rightarrow \mathcal{K}_-$  de um dos subespaços de deficiência no outro e é dado por*

$$\mathcal{D}_{T_U} = \{\psi + (I + U)\varphi \mid \psi \in \mathcal{D}_{\bar{T}}, \varphi \in \mathcal{K}_+, U\varphi \in \mathcal{K}_-\} \quad (2.3.4)$$

*onde  $\mathcal{D}_{\bar{T}}$  é o domínio do fecho  $\bar{T}$ , e*

$$T_U(\psi + (I + U)\varphi) = \bar{T}\psi + i\kappa(\varphi + U\varphi). \quad (2.3.5)$$

**Exemplo 2.3.1.** *Considere o sistema quântico não relativístico de uma partícula livre se movendo em um intervalo finito  $(0, L)$ . Definimos o hamiltoniano "livre" de Schrödinger  $H : \mathcal{D}_H \rightarrow \mathcal{H}$  por*

$$H = -\frac{d^2}{dx^2}. \quad (2.3.6)$$

*Como mencionamos anteriormente, é conveniente definirmos o domínio inicial de  $H$  como sendo o domínio de funções suaves com suporte compacto no intervalo  $(0, L)$ , denotado por  $\mathcal{D}_H = \mathfrak{D}(0, L)$ . Neste domínio,  $H$  é um operador simétrico, chamado de operador simétrico inicial, como mostra-se facilmente após uma integração por partes. O operador adjunto associado  $H^\dagger : \mathcal{D}_{H^\dagger} \rightarrow \mathcal{H}$ , neste caso coincide com  $H$  no domínio natural  $\mathcal{D}_{H^\dagger} = \mathfrak{D}(0, L)$ . Os subespaços de deficiência  $\mathcal{K}_\pm$  e os índices de deficiência do operador  $H$  de acordo com a Eq. (2.3.2) são determinados pelas soluções das equações diferenciais*

$$H^\dagger \psi_\pm(x) = H \psi_\pm(x) = -\frac{d^2 \psi_\pm}{dx^2} = \pm i \kappa^2 \psi_\pm(x), \quad (2.3.7)$$

*onde, vale deixar claro que a constante  $\kappa > 0$  é escolhida por questões dimensionais. As soluções das equações que geram os subespaços de deficiências  $\mathcal{K}_+$  e  $\mathcal{K}_-$  são ambas quadrado-integráveis no intervalo  $(0, L)$ , isto é*

$$\psi_+ = C_1 e^{\frac{(1-i)}{\sqrt{2}} \kappa x} + C_2 e^{-\frac{(1-i)}{\sqrt{2}} \kappa x} \Rightarrow \int_0^L dx |e^{\frac{(1-i)}{\sqrt{2}} \kappa x}|^2 < \infty, \int_0^L dx |e^{-\frac{(1-i)}{\sqrt{2}} \kappa x}|^2 < \infty$$

$$\psi_- = D_1 e^{\frac{(1+i)}{\sqrt{2}} \kappa x} + D_2 e^{-\frac{(1+i)}{\sqrt{2}} \kappa x} \Rightarrow \int_0^L dx |e^{\frac{(1+i)}{\sqrt{2}} \kappa x}|^2 < \infty, \int_0^L dx |e^{-\frac{(1+i)}{\sqrt{2}} \kappa x}|^2 < \infty$$

*Ou seja, ambas as integrais são finitas, e portanto  $\psi_+, \psi_- \in L^2(0, L)$ . Consequentemente, seus respectivos índices de deficiência são  $n_\pm = 2 > 0$ , portanto pelo teorema principal, existe uma família quadri-paramétrica de extensões auto-adjuntas  $H_U$  do operador  $H$ . No entanto, é mais conveniente descrever essas famílias de extensões auto-adjuntas e suas respectivas condições de contorno auto-adjuntas utilizando o formalismo AIM, que iremos abordar na seção a seguir.*

## 2.3.2 Formalismo AIM

Vimos que a teoria de von Neumann nos permite determinar extensões auto-adjuntas de operadores simétricos, descrita em termos dos seus subespaços de deficiência e



índices de deficiência. Contudo, na Ref. [38] foi desenvolvido uma formulação alternativa a teoria de von Neumann, que mostrou ser mais eficiente e explícita por ser dada apenas em termos das condições de contorno do sistema.

Sabemos que em sistemas quânticos envolvendo domínios limitados, a conservação de probabilidade, que é intrinsecamente conectada com o princípio de unitariedade que nos diz que

$$\int_{\mathcal{M}} d\tau |\psi|^2 = 1,$$

isto é, a soma sobre todo o espaço da função de onda per módulo quadrado,  $|\psi|^2$ , é igual a 1, ou usualmente chamada de condição de normalização da função de onda, impõe restrições rigorosas sobre a fronteira dos seus respectivos estados quânticos. Para a dinâmica dos sistemas quânticos ser bem definida precisamos que as condições de contorno sejam completamente especificadas. O formalismo AIM trata de considerar a teoria de condições de contorno globais que sejam compatíveis com as propriedades fundamentais dos sistemas quânticos onde esses sistemas estão confinados em um domínio limitado com contornos. Essas condições de contorno são determinadas a depender da natureza do operador hamiltoniano no interior desse domínio, e então as características físicas ficam determinadas através da escolha adequada das condições de contorno do problema.

Considere a dinâmica de uma partícula não relativística se movendo em uma variedade Riemanniana  $n$ -dimensional com suporte compacto  $(\mathcal{M}, g)$  com fronteira suave  $\Gamma = \partial\mathcal{M}$ , sobre a ação de um potencial suave  $V$ . Neste caso, a dinâmica de uma partícula quântica restrita a variedade  $\mathcal{M}$  é governada pelo hamiltoniano do tipo de Schrödinger

$$H_S = -\Delta_g + V, \quad (2.3.8)$$

onde  $\Delta_g$  é o operador de Laplace-Beltrami, e  $g$  representa a métrica Riemanniana, utilizando coordenadas locais  $\{x^i\}$  podemos definir esse operador por

$$\Delta_g = \sum_j \sum_k \frac{1}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial}{\partial x^j} \sqrt{|g|} g^{jk} \frac{\partial}{\partial x^k}. \quad (2.3.9)$$

O espaço de Hilbert desse sistema é o espaço das funções quadrado-integráveis na variedade  $\mathcal{M}$ ,  $L^2(\mathcal{M})$ . O formalismo AIM se concentra em caracterizar as diferentes extensões auto-adjuntas de  $H_S$  em termos apenas do contorno  $\partial\mathcal{M}$ . Seja  $\Phi \in L^2(\mathcal{M})$ , e denotemos por  $\varphi := \Phi|_{\partial\mathcal{M}}$ , a restrição de  $\Phi$  no contorno  $\partial\mathcal{M}$ . Vamos usar a notação com ponto para

denotar a derivada normal apontando para fora na fronteira  $\dot{\varphi} := \vec{n} \cdot \nabla \Phi|_{\partial \mathcal{M}}$ . Inicialmente, precisamos examinar quais condições temos que impor para que  $H_S$  seja um operador simétrico.

Sejam  $\Phi, \Psi \in L^2(\mathcal{M})$ . Então,

$$\begin{aligned} \langle \Phi, H_S \Psi \rangle_{\mathcal{M}} - \langle H_S \Phi, \Psi \rangle_{\mathcal{M}} &= \langle \Phi, (-\Delta_g + V) \Psi \rangle_{\mathcal{M}} - \langle (-\Delta_g + V) \Phi, \Psi \rangle_{\mathcal{M}} \\ &= -\langle \Phi, \Delta_g \Psi \rangle_{\mathcal{M}} + \langle \Phi, V \Psi \rangle_{\mathcal{M}} + \langle \Delta_g \Phi, \Psi \rangle_{\mathcal{M}} - \langle V \Phi, \Psi \rangle_{\mathcal{M}} \\ &= \langle \Delta_g \Phi, \Psi \rangle_{\mathcal{M}} - \langle \Phi, \Delta_g \Psi \rangle_{\mathcal{M}} \\ &= \langle \dot{\varphi}, \psi \rangle_{\partial \mathcal{M}} - \langle \varphi, \dot{\psi} \rangle_{\partial \mathcal{M}}. \end{aligned}$$

Note que nas passagens acima, usamos o fato de que o potencial  $V$  é real, a segunda fórmula de Green expressa por  $\int_{volume} d\tau (u \Delta v - v \Delta u) = \int_{contorno} dS (u \nabla v - v \nabla u) \cdot \vec{n}$ , e  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\partial \mathcal{M}}$  denota o produto interno do espaço de Hilbert das funções quadrado-integráveis no contorno  $\partial \mathcal{M}$ ,  $L^2(\partial \mathcal{M})$ . Para determinar as condições que levam as extensões auto-adjuntas do hamiltoniano de Schrödinger  $H_S$  precisamos olhar os subespaços maximais que fazem o termo de contorno se anular. Esse requisito de maximalidade, é necessário para garantir que o operador  $H_S$  seja auto-adjunto e não apenas simétrico. Pode ser visto na Ref. [38], que essas condições de contorno são obtidas por meio de uma transforção unitária entre os subespaços de deficiência, chamada de transformação de Cayley, definida por

$$\varphi_+ := \varphi + i\dot{\varphi}, \quad \varphi_- := \varphi - i\dot{\varphi}. \quad (2.3.10)$$

Em termos dessas novas variáveis o termo de contorno pode ser expresso como

$$i\langle \varphi_+, \psi_+ \rangle_{\partial \mathcal{M}} - i\langle \varphi_-, \psi_- \rangle_{\partial \mathcal{M}}. \quad (2.3.11)$$

Para o termo de contorno (2.3.11) se anular, devemos impor as condições de contorno na forma

$$\varphi_- = U \varphi_+ \Leftrightarrow \varphi - i\dot{\varphi} = U(\varphi + i\dot{\varphi}), \quad (2.3.12)$$

onde  $U \in \mathcal{U}(L^2(\partial \mathcal{M}))$  é um operador unitário no espaço de Hilbert do contorno. Existe uma correspondência biunívoca entre as extensões auto-adjuntas e operadores unitários no espaço de Hilbert do contorno.

**Exemplo 2.3.2.** *Partícula livre no intervalo  $\mathcal{M} = [0, L]$ . O contorno dessa variedade é neste caso  $\partial \mathcal{M} = \{0, L\}$  e, portanto, o grupo unitário atuando no espaço de Hilbert*

do contorno é  $\mathcal{U}(L^2(\partial\mathcal{M})) = U(2)$ . A métrica  $g$  é a métrica Euclidiana usual em  $\mathbb{R}$  e o operador de Laplace-Beltrami é o hamiltoniano de Schrödinger

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} \quad (2.3.13)$$

definido no domínio  $\mathcal{D}_H = C^\infty([0, L])$ . Portanto as diferentes extensões auto-adjuntas são parametrizadas por uma matriz unitária  $U \in U(2)$ . O domínio das extensões associadas é dado pelas funções do espaço  $L^2([0, L])$  cujo os valores de contorno satisfazem as seguintes equações,

$$\begin{pmatrix} \varphi(0) - i\dot{\varphi}(0) \\ \varphi(L) + i\dot{\varphi}(L) \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \varphi(0) + i\dot{\varphi}(0) \\ \varphi(L) - i\dot{\varphi}(L) \end{pmatrix}, \quad (2.3.14)$$

onde o ponto neste caso denota a derivada normal na direção  $x$ . A escolha da matriz unitária  $U$  define as condições de contorno do problema. Por exemplo, quando  $U = I_{2 \times 2}$  e  $U = -I_{2 \times 2}$ , as condições de contorno são conhecidas como condições de contorno de Neumann e Dirichlet respectivamente. Vimos no Ex. (2.3.1) utilizando a teoria de von Neumann que para o operador (2.3.13) no domínio considerado possui uma família quadri-paramétrica de extensões auto-adjuntas. Para determinar essa família, podemos parametrizar a matriz unitária  $U$ , por exemplo, da seguinte forma

$$U = e^{i\theta} \begin{pmatrix} \rho e^{i\varphi} & \kappa e^{i\eta} \\ -\kappa e^{-i\eta} & \rho e^{-i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (2.3.15)$$

onde  $\varphi, \theta, \eta \in (-\pi, \pi)$ ,  $\rho, \kappa \in (0, 1)$ ,  $\rho^2 + \kappa^2 = 1$ .

## Capítulo 3

### Hamiltoniano de Dirac

### Auto-Adjunto no Intervalo Finito

Neste capítulo, iremos aplicar a teoria que abordamos até o momento, para o caso do hamiltoniano de Dirac para partícula "livre" em uma dimensão espacial no intervalo finito  $(0, L)$ . Utilizando a teoria de von Neumann, determinamos explicitamente os subespaços e índices de deficiências associados e garantimos a existência de uma família quadri-paramétrica de extensões auto-adjuntas pelo Teorema. (2.3.1). Utilizando o formalismo AIM formulamos explicitamente as condições de contorno gerais que nos levam a uma família de hamiltonianos de Dirac auto-adjuntos. A partir das condições de contorno gerais, determinamos a equação que define o espectro de energia da partícula e a forma explícita das autofunções associadas a família quadri-paramétrica. A partir do espectro obtemos alguns casos particulares, tais como condições de contorno periódicas e anti-periódicas, e condições de contorno MIT [54] e MIT generalizada. Discutimos a especificidade da existência de estados com energia menor que a energia de repouso e demonstraremos graficamente a dependência da energia dos parâmetros de extensões para algumas classes particulares bi-paramétricas da família. Iremos demonstrar explicitamente a ortogonalidade das autofunções dos hamiltonianos da família. Finalmente, apresentamos o esquema para prova da completeza dos conjuntos das autofunções dos hamiltonianos da família.

### 3.1 Equação de Dirac

Nesta seção, vamos abordar a dedução da equação de Dirac para o caso geral que descreve uma partícula relativística com spin  $\frac{1}{2}$  se movendo no espaço tridimensional  $\mathbb{R}^3$ . A partir da equação de Dirac em 3 dimensões espaciais, vamos analisar o caso particular sobre o estudo do hamiltoniano de Dirac no caso em que temos apenas uma dimensão espacial restrito ao intervalo finito  $(0, L)$ , que será o objeto de estudo.

Formalmente, a transição da mecânica clássica para a mecânica quântica é feita mediante a substituição das relações clássicas pela utilização de operadores diferenciais associados, que atuam em uma função de onda adequada. Em particular, para a energia  $E$  e momento da partícula  $\mathbf{p}$ , essa substituição é feita da seguinte forma

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \longrightarrow -i\hbar \nabla,$$

onde,  $\hbar$  é a constante de Planck,  $\nabla = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$  é o operador nabla no espaço tridimensional. Para simplificar a notação, representaremos as derivadas parciais em relação ao tempo e aos parâmetros espaciais  $(x, y, z)$  respectivamente por,  $\partial_t, \partial_x, \partial_y, \partial_z$ . Essa substituição é familiar na teoria quântica não relativística. Aplicando essas substituições na relação relativística de energia-momento

$$E = \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4}, \tag{3.1.1}$$

atuando numa função de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  obtemos a raiz quadrada da equação de Klein-Gordon

$$i\hbar \partial_t \Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

onde  $\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$  é o operador laplaciano usual no espaço tridimensional, o vetor  $\mathbf{r} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  é o vetor posição da partícula, e  $t \in \mathbb{R}$ . Devido a assimetria do espaço e derivadas temporais, na teoria de Dirac foi encontrada uma impossibilidade de incluir campos eletromagnéticos externos que fossem relativisticamente invariantes. Então a ideia de Dirac foi modificar a equação de Klein-Gordon de tal modo que fosse possível descrever a ação das forças eletromagnéticas e que também descrevesse a estrutura interna do elétron, o spin. Contudo, para descrever a evolução na mecânica quântica é preciso de uma equação que seja de 1º ordem em relação a derivadas temporais. Com isso, nesta teoria foi reconsiderada a relação (3.1.1) e antes de aplicar as substituições quânticas de

$E$  e  $\mathbf{p}$ , ele a linearizou da seguinte forma

$$E = c \sum_{i=1}^3 \alpha_i p_i + mc^2 \beta = c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + mc^2 \beta, \quad (3.1.2)$$

onde os parâmetros  $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  e  $\beta$  devem ser determinados da Eq. (3.1.1). Entretanto, para satisfazer essas relações devemos assumir que  $\boldsymbol{\alpha}$  e  $\beta$  são quantidades que anti-comutam e que naturalmente representamos essas quantidades por matrizes  $4 \times 4$ , chamadas matrizes de Dirac. Comparando a quantidade  $E^2$  da Eq. (3.1.1) com a Eq. (3.1.2), chegamos as seguintes relações entre  $\boldsymbol{\alpha}$  e  $\beta$

$$\begin{aligned} \alpha_l \alpha_m + \alpha_m \alpha_l &= 2\delta_{lm} \mathbf{I}, \quad (l, m = 1, 2, 3) \\ \alpha_l \beta + \beta \alpha_l &= \mathbf{0}, \quad (l = 1, 2, 3) \\ \beta^2 &= \mathbf{I}, \end{aligned}$$

onde  $\delta_{lm}$  é o simbolo delta de kronecker usual,  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade  $4 \times 4$  e  $\mathbf{0}$  é a matriz nula  $4 \times 4$ . Em 4 dimensões as relações são satisfeitas para as matrizes de Dirac na forma de matrizes em blocos

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad \alpha_l = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_l \\ \boldsymbol{\sigma}_l & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (3.1.3)$$

onde

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

são matrizes de Pauli. Essa representação das matrizes de Dirac é chamada a representação de Dirac.

Agora, substituindo as quantidades de  $E$  e  $\mathbf{p}$  por suas quantidades equivalentes quantizadas na Eq. (3.1.2) obtemos a equação de Dirac

$$i\hbar \partial_t \Psi(\mathbf{r}, t) = H_D \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.1.4)$$

onde,  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  agora é denominado por spinor de Dirac e no lado direito da Eq. (3.1.4) fazemos a identificação de  $H_D$  como sendo o hamiltoniano de Dirac, expresso por

$$H_D = -i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + mc^2 \beta. \quad (3.1.5)$$

Uma observação importante é que os resultados físicos não dependem da escolha especial das matrizes de Dirac  $\alpha$ ,  $\beta$ , mas os cálculos podem se tornar particularmente mais simples em certa representação.

Uma das mais importantes equações da física é a chamada equação da continuidade que na mecânica quântica é relacionada a conservação de probabilidade. Para sua dedução associada a equação de Dirac, vamos escrever a Eq. (3.1.4) hermitiano conjugada:

$$-i\hbar\partial_t\Psi^\dagger = (H_D\Psi)^\dagger. \quad (3.1.6)$$

Então, se multiplicarmos a Eq. (3.1.4) por  $\Psi^\dagger$  pela esquerda, depois multiplicar a Eq. (3.1.6) por  $\Psi$  pela direita e subtrair as equações resultantes, obtemos

$$i\hbar\frac{\partial(\Psi^\dagger\Psi)}{\partial t} = \Psi^\dagger H_D\Psi - (H_D\Psi)^\dagger\Psi = -i\hbar\nabla \cdot (\Psi^\dagger\vec{\alpha}\Psi),$$

onde fazemos as identificações,  $\rho = \Psi^\dagger\Psi$  é densidade de probabilidade e  $\vec{j} = \Psi^\dagger\vec{\alpha}\Psi$  é a densidade de corrente de probabilidade, e finalmente chegamos a equação de continuidade

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0. \quad (3.1.7)$$

A densidade de probabilidade  $\rho$  é positivamente definida.

## 3.2 Hamiltoniano de Dirac Unidimensional no Intervalo Finito

Por questão de simplificação utilizaremos unidades naturais:  $c = 1$ ,  $\hbar = 1$ . Em uma dimensão espacial o hamiltoniano de Dirac segundo a Eq. (3.1.5) assume a forma

$$H_D = -i\alpha\partial_x + m\beta. \quad (3.2.1)$$

onde  $\alpha$ ,  $\beta$  obedecem as relações

$$\alpha^2 = 1, \beta^2 = 1, \alpha\beta + \beta\alpha = 0. \quad (3.2.2)$$

A equação de Dirac que descreve os estados estacionários de uma partícula "livre" relativística dentro de uma caixa unidimensional, onde  $x \in (0, L)$  é dada por

$$H_D\psi = -i\alpha\partial_x\psi + m\beta\psi = \varepsilon\psi, \quad (3.2.3)$$

onde  $\varepsilon$  denota a energia.

A partir de agora, iremos trabalhar com o espaço de Hilbert  $\mathcal{H} = L^2(0, L) \oplus L^2(0, L)$  dos spinors de duas componentes quadrado-integráveis no intervalo  $(0, L)$  :

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \phi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix} \in \mathcal{H},$$

onde  $\phi(x) \in L^2(0, L)$  e  $\chi(x) \in L^2(0, L)$ . O produto interno e a norma neste espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  são dados respectivamente por

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \int_0^L dx \psi_1^\dagger(x) \psi_2(x) = \int_0^L dx (\phi_1^*(x) \phi_2(x) + \chi_1^*(x) \chi_2(x)), \quad (3.2.4)$$

$$\|\psi(x)\| = \sqrt{\int_0^L dx \psi^\dagger(x) \psi(x)} = \sqrt{\int_0^L dx (|\phi(x)|^2 + |\chi(x)|^2)}. \quad (3.2.5)$$

### 3.2.1 Teoria de von Neumann

Inicialmente, como domínio  $\mathcal{D}_0$  de  $H_D$ , escolhemos o espaço dos spinores de duas componentes suaves com suporte compacto  $\mathfrak{D}(0, L)$  no intervalo  $(0, L)$ .

$$\mathcal{D}_0 = \{\psi(x) : \phi(x), \chi(x) \in \mathfrak{D}(0, L)\}. \quad (3.2.6)$$

Podemos aplicar a teoria de von Neumann utilizando o domínio inicial  $\mathcal{D}_0$  de  $H_D$ . Como  $\mathfrak{D}(0, L)$  é denso em  $L^2(0, L)$ , segue que  $\mathcal{D}_0$  também é denso em  $\mathcal{H}$ . A teoria de von Neumann nos diz que para construirmos as extensões auto-adjuntas de  $H_D$  primeiramente, temos que verificar se  $H_D$  é simétrico, determinar o operador adjunto associado e então procurar por extensões auto-adjuntas a partir da análise dos seus subespaços de deficiência e determinação dos índices de deficiência. Vamos utilizar a representação das matrizes de Dirac da forma  $\alpha = \sigma_3$  e  $\beta = \sigma_2$  e verificar se  $H_D$  é simétrico.

Sejam  $\psi_1(x), \psi_2(x) \in \mathcal{D}_0$ , então,

$$\langle \psi_1(x), H_D \psi_2(x) \rangle = \int_0^L dx \psi_1^\dagger(x) (-i\sigma_3 \partial_x + m\sigma_2) \psi_2(x),$$

realizando uma integração por partes e usando o fato de que  $\sigma_i^\dagger = \sigma_i$ , obtemos

$$\begin{aligned} \langle \psi_1(x), H_D \psi_2(x) \rangle &= [-i\psi_1^\dagger(x) \sigma_3 \psi_2(x)]_0^L - \int_0^L dx (-i\sigma_3 \partial_x \psi_1^\dagger(x) \psi_2(x)) + m\sigma_2 \psi_1^\dagger(x) \psi_2(x) \\ &= [-i\psi_1^\dagger(x) \sigma_3 \psi_2(x)]_0^L + \int_0^L dx (i\sigma_3 \partial_x \psi_1^\dagger(x) + m\sigma_2 \psi_1^\dagger(x)) \psi_2(x) \\ &= [-i\psi_1^\dagger(x) \sigma_3 \psi_2(x)]_0^L + \int_0^L dx (-i\sigma_3 \partial_x \psi_1(x) + m\sigma_2 \psi_1(x))^\dagger \psi_2(x) \\ &= [-i\psi_1^\dagger(x) \sigma_3 \psi_2(x)]_0^L + \langle H_D \psi_1(x), \psi_2(x) \rangle. \end{aligned}$$

Ou seja,

$$\langle \psi_1(x), H_D \psi_2(x) \rangle - \langle H_D \psi_1(x), \psi_2(x) \rangle = [-i\psi_1^\dagger(x) \sigma_3 \psi_2(x)]_0^L.$$



Como  $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{D}_0$  vemos que

$$[-i\psi_1^\dagger(x)\sigma_3\psi_2(x)]_0^L = 0.$$

Portanto confirmamos que o hamiltoniano de Dirac com domínio  $\mathcal{D}_0$  é simétrico.

Nossa segunda tarefa agora é determinar o operador adjunto  $H_D^\dagger$  associado ao operador simétrico  $H_D$ , e vamos mostrar que o domínio  $\mathcal{D}_0 \subset \mathcal{D}_{H_D^\dagger}$ . Do fato que  $\mathcal{D}_0$  é denso em  $\mathcal{H}$  segue que o operador adjunto existe. Determinaremos o operador adjunto a partir do produto interno :

$$\begin{aligned} \psi_2 \in \mathcal{D}_0, \langle \psi_1(x), H_D \psi_2(x) \rangle &= [-i\psi_1^\dagger(x)\sigma_3\psi_2(x)]_0^L + \\ &+ \int_0^L dx (-i\sigma_3 \partial_x \psi_1(x) + m\sigma_2 \psi_1(x))^\dagger \psi_2(x). \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

Na Eq. (3.2.7) o termo fora da integral é nulo porque  $\psi_2 \in \mathcal{D}_0$  e a expressão que atua na função  $\psi_1$  determina a forma do operador adjunto:

$$H_D^\dagger = -i\sigma_3 \partial_x + m\sigma_2 = H_D. \quad (3.2.8)$$

As funções  $\psi_1$  do domínio  $\mathcal{D}_{H_D^\dagger}$  não são especificados por qualquer restrição. Então obtemos  $H_D^\dagger = H_D$  mas  $\mathcal{D}_0 \subset \mathcal{D}_{H_D^\dagger}$ , portanto  $H_D$  com domínio  $\mathcal{D}_0$  não é auto-adjunto.

Em seguida vamos determinar os subespaços de deficiência e índices de deficiência associados ao operador  $H_D$ . Ou seja, determinar os pares  $(\mathcal{K}_\pm, n_\pm)$ , onde

$$\mathcal{K}_\pm = \text{Ker}(H_D^\dagger \mp i\kappa) = \{\psi_\pm : (H_D^\dagger \mp i\kappa)\psi_\pm = 0\}, \quad n_\pm = \dim \mathcal{K}_\pm. \quad (3.2.9)$$

Explicitamente, os subespaços de deficiência  $\mathcal{K}_\pm$  serão determinados pelas soluções das equações diferenciais

$$H_D^\dagger \psi_\pm = \pm i\kappa \psi_\pm, \quad (3.2.10)$$

e os índices de deficiência associados,  $n_\pm$ , serão dados pelo número de funções linearmente independentes que constituem o espaço gerado pelas soluções das respectivas equações diferenciais. Inserindo a definição de  $H_D^\dagger$  dada pela Eq. (3.2.8) na Eq. (3.2.10), obtemos

$$-i\alpha \partial_x \psi_\pm + m\beta \psi_\pm = \pm i\kappa \psi_\pm. \quad (3.2.11)$$

Utilizando a representação em que  $\alpha = \sigma_3$  e  $\beta = \sigma_2$  e a definição do spinor de duas componentes  $\psi_\pm$ , a Eq. (3.2.11) se traduz nos seguintes sistemas de equações diferenciais

$$\begin{cases} -\partial_x \phi_\pm - m\chi_\pm = \pm \kappa \phi_\pm \\ \partial_x \chi_\pm + m\phi_\pm = \pm \kappa \chi_\pm \end{cases} \quad (3.2.12)$$

Para a determinação do par  $(\mathcal{K}_+, n_+)$ , podemos reescrever o sistema dado pela Eq. (3.2.12) como

$$\begin{cases} -(\partial_x + \kappa)\phi_+ - m\chi_+ = 0 \\ m\phi_+ + (\partial_x - \kappa)\chi_+ = 0 \end{cases} \quad (3.2.13)$$

Utilizando a regra de Cramer aplicada a operadores diferenciais, que pode ser encontrada por exemplo na Ref. [47], a solução do sistema dado pela Eq. (3.2.13) pode ser obtida do seguinte modo

$$\text{Det}_p \phi_+ = \text{Det} \phi_+, \quad \text{Det}_p \chi_+ = \text{Det} \chi_+ \quad (3.2.14)$$

onde

$$\text{Det}_p = \begin{vmatrix} -\partial_x - \kappa & -m \\ m & \partial_x - \kappa \end{vmatrix} = -\partial_x^2 + (m^2 + \kappa^2),$$

$$\text{Det} \phi_+ = \begin{vmatrix} 0 & -m \\ 0 & \partial_x - \kappa \end{vmatrix} = 0, \quad \text{Det} \chi_+ = \begin{vmatrix} -\partial_x - \kappa & 0 \\ m & 0 \end{vmatrix} = 0. \quad (3.2.15)$$

A partir das relações (3.2.14), (3.2.15), as funções  $\phi_+$  e  $\chi_+$  satisfazem as seguintes equações diferenciais de segunda ordem

$$\partial_x^2 \phi_+ = (m^2 + \kappa^2)\phi_+, \quad \partial_x^2 \chi_+ = (m^2 + \kappa^2)\chi_+. \quad (3.2.16)$$

Definindo  $p^2 = m^2 + \kappa^2$ , as soluções das equações diferenciais (3.2.16), podem ser escritas por

$$\phi_+ = Ae^{px} + Be^{-px}, \quad \chi_+ = Ce^{px} + De^{-px}. \quad (3.2.17)$$

Inserindo a Eq. (3.2.17) no sistema (3.2.13) encontramos relações entre as constantes  $C, D$  em termos das constantes  $A, B$  expressas por

$$C = -\left(\frac{p + \kappa}{m}\right)A, \quad D = \left(\frac{p - \kappa}{m}\right)B, \quad (3.2.18)$$

e consequentemente, podemos escrever explicitamente o spinor de duas componentes  $\psi_+$  que assume a forma  $\psi_+ = Au_{+1}e^{px} + Bu_{+2}e^{-px}$ , onde  $u_{\pm}$  são spinores constantes de duas componentes expressos por

$$u_{+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ -\left(\frac{p+\kappa}{m}\right) \end{pmatrix}, \quad u_{+2} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{p-\kappa}{m} \end{pmatrix}. \quad (3.2.19)$$

Portanto,  $\text{Span } \mathcal{K}_+ = \{u_{+1}e^{px}, u_{+2}e^{-px}\}$ . Para determinar o índice de deficiência  $n_+$  associado ao subespaço de deficiência  $\mathcal{K}_+$ , precisamos verificar se esses spinors de duas componentes são quadrado-integráveis no espaço  $\mathcal{H}$ . De fato,

$$\int_0^L dx u_{+1}^\dagger u_{+1} e^{2px} = \frac{m^2 + (p + \kappa)^2}{2pm^2} (e^{2pL} - 1) < \infty, \quad (3.2.20)$$

como a integral acima é finita, segue que  $u_{+1}e^{px} \in \mathcal{H}$ . De forma análoga,

$$\int_0^L dx u_{+2}^\dagger u_{+2} e^{-2px} = \frac{m^2 + (p - \kappa)^2}{2pm^2} (1 - e^{-2pL}) < \infty, \quad (3.2.21)$$

como a integral é finita, segue que  $u_{+2}e^{-px} \in \mathcal{H}$ . Consequentemente,  $n_+ = 2$ .

Vamos agora determinar o par  $(K_-, n_-)$ . Neste caso, a Eq. (3.2.12) pode ser escrita como

$$\begin{cases} (-\partial_x + \kappa)\phi_- - m\chi_- = 0 \\ m\phi_- + (\partial_x + \kappa)\chi_- = 0 \end{cases} \quad (3.2.22)$$

Utilizando novamente a regra de Cramer, obtemos neste caso

$$\text{Det}_p = \begin{vmatrix} -\partial_x + \kappa & -m \\ m & \partial_x + \kappa \end{vmatrix} = -\partial_x^2 + (m^2 + \kappa^2),$$

$$\text{Det } \phi_- = \begin{vmatrix} 0 & -m \\ 0 & \partial_x + \kappa \end{vmatrix} = 0, \quad \text{Det } \chi_- = \begin{vmatrix} -\partial_x + \kappa & 0 \\ m & 0 \end{vmatrix} = 0. \quad (3.2.23)$$

Com isso, vemos que  $\phi_-$  e  $\chi_-$  satisfazem as seguintes equações diferenciais de segunda ordem

$$\partial_x^2 \phi_- = (m^2 + \kappa^2)\phi_-, \quad \partial_x^2 \chi_- = (m^2 + \kappa^2)\chi_-. \quad (3.2.24)$$

Definindo novamente  $p^2 = m^2 + \kappa^2$ , as soluções das equações diferenciais (3.2.24), podem ser escritas por

$$\phi_- = Ee^{px} + Fe^{-px}, \quad \chi_- = Ge^{px} + He^{-px}. \quad (3.2.25)$$

Inserindo a Eq. (3.2.25) no sistema (3.2.22), encontramos relações entre as constantes  $G, H$  em termos das constantes  $E, F$  expressas por

$$G = \left(\frac{p - \kappa}{m}\right)E, \quad H = \left(\frac{p + \kappa}{m}\right)F, \quad (3.2.26)$$

e consequentemente, podemos escrever explicitamente o spinor de duas componentes  $\psi_-$  que assume a forma  $\psi_- = Eu_{-1}e^{px} + Fu_{-2}e^{-px}$ , onde  $u_\pm$  são spinors constantes de duas

componentes expressos por

$$u_{-1} = \begin{pmatrix} 1 \\ \left(\frac{p-\kappa}{m}\right) \end{pmatrix}, \quad u_{-2} = \begin{pmatrix} 1 \\ \left(\frac{p+\kappa}{m}\right) \end{pmatrix}. \quad (3.2.27)$$

Portanto,  $\text{Span } \mathcal{K}_- = \{u_{-1}e^{px}, u_{-2}e^{-px}\}$ . Para determinar o índice de deficiência  $n_-$  associado ao subespaço de deficiência  $\mathcal{K}_-$ , precisamos verificar se esses spinors de duas componentes são quadrado-integráveis no espaço  $\mathcal{H}$ . De fato,

$$\int_0^L dx u_{-1}^\dagger u_{-1} e^{2px} = \frac{m^2 + (p-\kappa)^2}{2pm^2} (e^{2pL} - 1) < \infty, \quad (3.2.28)$$

como a integral acima é finita, segue que  $u_{-1}e^{px} \in \mathcal{H}$ . De forma análoga,

$$\int_0^L dx u_{-2}^\dagger u_{-2} e^{-2px} = \frac{m^2 + (p+\kappa)^2}{2pm^2} (1 - e^{-2pL}) < \infty, \quad (3.2.29)$$

como a integral acima também é finita, segue que  $u_{-2}e^{-px} \in \mathcal{H}$ . Portanto,  $n_- = 2$ . Com isso, chegamos ao resultado que  $n_\pm = 2 > 0$ , ou seja, os subespaços de deficiência  $\mathcal{K}_+$  e  $\mathcal{K}_-$  do operador  $H_D$  são isomorfos. Assim, pelo Teorema (2.3.1), o operador  $H_D$  possui extensões auto-adjuntas  $H_{D_U} = H_{D_U}^\dagger$ , com  $H_D \subseteq H_{D_U}$  e como consequência, existe uma família quadri-paramétrica  $H_{D_U}$  de extensões auto-adjuntas. Para descrever essa família, iremos utilizar o formalismo AIM.

### 3.2.2 Formalismo AIM

As condições de contorno mais gerais que levam a um hamiltoniano de Dirac auto-adjunto são descritas pelo formalismo AIM no artigo [39] que é elaborado para o caso spinorial em dimensão arbitrária  $d$ . Nas notações da Ref. [39] as condições de contorno tem a forma:

$$(1 - \vec{\gamma} \cdot \vec{n})\psi = U\gamma^{d+1}(1 + \vec{\gamma} \cdot \vec{n})\psi. \quad (3.2.30)$$

Na Eq. (3.2.30), 1 denota a matriz identidade e  $U$  é um operador unitário que comuta com  $\vec{\gamma} \cdot \vec{n}$  e  $\vec{n}$  é o vetor normal unitário a superfície da variedade,  $\psi$  é usado para spinors na superfície da variedade. No nosso caso, a variedade  $\mathcal{M}$  é simplesmente o intervalo finito  $(0, L)$ ,  $\mathcal{M} = (0, L)$ . A fronteira é descrita simplesmente pelos dois pontos extremos do intervalo  $(0, L)$ ,  $\partial\mathcal{M} = \{0, L\}$ . Nas notações deste trabalho as condições de contorno Eq. (3.2.30) toma a forma

$$\begin{pmatrix} (1 - \alpha n_1)\psi_0 \\ (1 - \alpha n_1)\psi_L \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \beta(1 + \alpha n_1)\psi_0 \\ \beta(1 + \alpha n_1)\psi_L \end{pmatrix}, \quad (3.2.31)$$

onde,  $\alpha, \beta$  são matrizes de Dirac,  $\psi_0 = \psi(0)$ ,  $\psi_L = \psi(L)$ ,  $n_1$  é a componente do vetor normal unitário no eixo  $x$ ,  $1$  agora é a matriz identidade  $2 \times 2$ ,  $U$  representa o operador unitário que neste caso pode ser apresentado como uma matriz unitária  $4 \times 4$  que é formada de blocos  $2 \times 2$ . Observando que  $\alpha n_1 \psi_0 = -\alpha \psi_0$ ,  $\alpha n_1 \psi_L = \alpha \psi_L$ , reescrevemos a Eq. (3.2.31) na forma

$$\begin{pmatrix} (1 + \alpha)\psi_0 \\ (1 - \alpha)\psi_L \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \beta(1 - \alpha)\psi_0 \\ \beta(1 + \alpha)\psi_L \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} (1 + \alpha)\beta\psi_0 \\ (1 - \alpha)\beta\psi_L \end{pmatrix}. \quad (3.2.32)$$

Para obedecer a exigência sobre o operador unitário  $U$  das condições de contorno gerais, Eq. (3.2.30), no caso considerado a matriz unitária  $U$  da Eq. (3.2.32) deve obedecer a relação de comutação

$$U \begin{pmatrix} 1 + \alpha & 0 \\ 0 & 1 - \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \alpha & 0 \\ 0 & 1 - \alpha \end{pmatrix} U. \quad (3.2.33)$$

Apresentando a matriz  $U$  na forma

$$U = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix}, \quad (3.2.34)$$

onde os blocos  $U_{ij}$  são matrizes  $2 \times 2$ , continuamos o lado direito da Eq. (3.2.32) da seguinte forma

$$\begin{pmatrix} 1 + \alpha & 0 \\ 0 & 1 - \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta\psi_0 \\ \beta\psi_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 + \alpha)(U_{11}\beta\psi_0 + U_{12}\beta\psi_L) \\ (1 - \alpha)(U_{21}\beta\psi_0 + U_{22}\beta\psi_L) \end{pmatrix}. \quad (3.2.35)$$

Utilizando a Eq. (3.2.33) determinamos a forma da matriz  $U$ . Escrevemos a Eq. (3.2.33) na forma explícita

$$\begin{pmatrix} U_{11}(1 + \alpha) & U_{12}(1 - \alpha) \\ U_{21}(1 + \alpha) & U_{22}(1 - \alpha) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 + \alpha)U_{11} & (1 + \alpha)U_{12} \\ (1 - \alpha)U_{21} & (1 - \alpha)U_{22} \end{pmatrix}. \quad (3.2.36)$$

Igualando as entradas dos blocos, segue que

$$\begin{cases} U_{11} \alpha = \alpha U_{11}, \\ U_{22} \alpha = \alpha U_{22}, \\ U_{12} \alpha = -\alpha U_{12}, \\ U_{21} \alpha = -\alpha U_{21}. \end{cases} \quad (3.2.37)$$

Para a matriz unitária  $U$  da Eq. (3.2.34) usaremos a seguinte parametrização

$$U = e^{i\theta} \begin{pmatrix} \rho e^{i\varphi} A & \kappa e^{i\eta} B \\ -\kappa e^{-i\eta} B^\dagger & \rho e^{-i\varphi} A^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.2.38)$$

$$\varphi, \theta, \eta \in (-\pi, \pi), \rho, \kappa \in (0, 1), \rho^2 + \kappa^2 = 1,$$

onde  $A, B$  são matrizes unitárias e satisfazem

$$[A, B] = AB - BA = 0. \quad (3.2.39)$$

Para obedecer as relações (3.2.37) e (3.2.39) as matrizes  $A$  e  $B$  devem ter a forma em termos das matrizes de Dirac  $\alpha$  e  $\beta$ , por exemplo:

$$A = iI, \quad B = -\beta\alpha. \quad (3.2.40)$$

Essa forma explicita será explicada mais tarde. Com isso a matriz unitária  $U$  toma a forma

$$U = e^{i\theta} \begin{pmatrix} i\rho e^{i\varphi} & -\kappa e^{i\eta} \beta\alpha \\ \kappa e^{-i\eta} \alpha\beta & -i\rho e^{-i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (3.2.41)$$

e o lado direito da Eq. (3.2.35) toma a forma

$$\begin{pmatrix} (1+\alpha)e^{i\theta}(i\rho e^{i\varphi}\beta\psi_0 - \kappa e^{i\eta}\beta\alpha\psi_L) \\ (1-\alpha)e^{i\theta}(\kappa e^{-i\eta}\alpha\beta\psi_0 - i\rho e^{-i\varphi}\beta\psi_L) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1+\alpha)e^{i\theta}(i\rho e^{i\varphi}\beta\psi_0 + \kappa e^{i\eta}\alpha\psi_L) \\ (1-\alpha)e^{i\theta}(\kappa e^{-i\eta}\alpha\psi_0 - i\rho e^{-i\varphi}\beta\psi_L) \end{pmatrix}. \quad (3.2.42)$$

Portanto chegamos a Eq. (3.2.32) expressa na forma:

$$\begin{pmatrix} (1+\alpha)\psi_0 \\ (1-\alpha)\psi_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1+\alpha)e^{i\theta}(\rho e^{i\varphi}\beta\psi_0 - \kappa e^{i\eta}\alpha\psi_L) \\ (1-\alpha)e^{i\theta}(-\kappa e^{-i\eta}\alpha\psi_0 + \rho e^{-i\varphi}\beta\psi_L) \end{pmatrix}. \quad (3.2.43)$$

Escolhendo as matrizes  $\alpha$  e  $\beta$  como  $\alpha = \sigma_3$  e  $\beta = \sigma_2$ , podemos observar que

$$\frac{1}{2}(1+\alpha)\psi_0 = \frac{1}{2} \left[ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.2.44)$$

e

$$\frac{1}{2}(1-\alpha)\psi_L = \frac{1}{2} \left[ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \phi_L \\ \chi_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_L \\ \chi_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_L \end{pmatrix}. \quad (3.2.45)$$

Respectivamente para a parte direita da Eq. (3.2.43) temos

$$\frac{1}{2}(1+\alpha)e^{i\theta}(i\rho e^{i\varphi}\beta\psi_0 + \kappa e^{i\eta}\alpha\psi_L) = e^{i\theta} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho e^{i\varphi}\chi_0 + \kappa e^{i\eta}\phi_L \\ -\rho e^{i\varphi}\phi_0 - \kappa e^{i\eta}\chi_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho e^{i\varphi}\chi_0 + \kappa e^{i\eta}\phi_L \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.2.46)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(1-\alpha)e^{i\theta}(\kappa e^{-i\eta}\alpha\psi_0 - i\rho e^{-i\varphi}\beta\psi_L) &= e^{i\theta} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa e^{-i\eta}\phi_0 - \rho e^{-i\varphi}\chi_L \\ -\kappa e^{-i\eta}\chi_0 + \rho e^{-i\varphi}\phi_L \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ -\kappa e^{-i\eta}\chi_0 + \rho e^{-i\varphi}\phi_L \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.2.47)$$

Comparando a Eq. (3.2.44) com a Eq. (3.2.46) e a Eq. (3.2.45) com a Eq. (3.2.47) obtemos as condições de contorno

$$\begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_L \end{pmatrix} = e^{i\theta} \begin{pmatrix} \rho e^{i\varphi}\chi_0 + \kappa e^{i\eta}\phi_L \\ -\kappa e^{-i\eta}\chi_0 + \rho e^{-i\varphi}\phi_L \end{pmatrix}. \quad (3.2.48)$$

As condições de contorno podem ser obtidas da seguinte interpretação física. Da equação da continuidade (3.1.7) temos a condição: a corrente de probabilidade na extremidade  $x = 0$  deve ser igual a corrente na extremidade  $x = L$ :

$$j(0) = j(L), \quad j = \psi^\dagger \alpha \psi. \quad (3.2.49)$$

Na escolha de  $\alpha = \sigma_3$  temos

$$j = \psi^\dagger \alpha \psi = (\phi^* \ \chi^*) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = (\phi^* \ \chi^*) \begin{pmatrix} \phi \\ -\chi \end{pmatrix} = \phi^* \phi - \chi^* \chi = |\phi|^2 - |\chi|^2. \quad (3.2.50)$$

Portanto,

$$|\phi(0)|^2 - |\chi(0)|^2 = |\phi(L)|^2 - |\chi(L)|^2. \quad (3.2.51)$$

Vamos rearranjar os termos da Eq. (3.2.51) da seguinte forma

$$|\phi(0)|^2 + |\chi(L)|^2 = |\chi(0)|^2 + |\phi(L)|^2, \quad (3.2.52)$$

as expressões ao lado esquerdo e direito da Eq. (3.2.52) interpretamos como o quadrado da norma dos vetores

$$\Gamma_+ = \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_L \end{pmatrix} \text{ e } \Gamma_- = \begin{pmatrix} \chi_0 \\ \phi_L \end{pmatrix}, \quad (3.2.53)$$

$$|\phi(0)|^2 + |\chi(L)|^2 = \|\Gamma_+\|^2, \quad |\chi(0)|^2 + |\phi(L)|^2 = \|\Gamma_-\|^2.$$

O quadrado da norma não muda sob ação da transformação unitária  $\|\Gamma_-\|^2 = \|U\Gamma_-\|^2$ .

Então no caso geral a Eq. (3.2.52) é satisfeita quando

$$\Gamma_+ = U\Gamma_-. \quad (3.2.54)$$

No caso considerado a transformação unitária  $U$  é representada pela matriz unitária  $2 \times 2$ . Usando a parametrização da matriz unitária  $U$  na forma

$$U = e^{i\theta} \begin{pmatrix} \rho e^{i\varphi} & \kappa e^{i\eta} \\ -\kappa e^{-i\eta} & \rho e^{-i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (3.2.55)$$

podemos escrever a Eq. (3.2.54) como

$$\begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_L \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \chi_0 \\ \phi_L \end{pmatrix} = e^{i\theta} \begin{pmatrix} \rho e^{i\varphi} & \kappa e^{i\eta} \\ -\kappa e^{-i\eta} & \rho e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_0 \\ \phi_L \end{pmatrix}, \quad (3.2.56)$$

ou

$$\begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_L \end{pmatrix} = e^{i\theta} \begin{pmatrix} \rho e^{i\varphi} \chi_0 + \kappa e^{i\eta} \phi_L \\ -\kappa e^{-i\eta} \chi_0 + \rho e^{-i\varphi} \phi_L \end{pmatrix}, \quad (3.2.57)$$

que representa as condições de contorno para spinores no intervalo finito em uma dimensão. A Eq. (3.2.57) reproduz a Eq. (3.2.48) das condições de contorno obtidos pelo formalismo AIM. Notamos que outra escolha das matrizes unitárias  $A$  e  $B$  na Eq. (3.2.38) leva a outra parametrização da matriz unitária  $U$ . Esse resultado é confirmado pelo resultado da Ref. [31] levando em conta que nesta referência é utilizada outra parametrização das condições de contorno.

### 3.3 As Propriedades da Família Quadri-Paramétrica dos Hamiltonianos de Dirac Auto-Adjuntos

#### 3.3.1 Equação do Espectro

Nas seções anteriores mostramos que existe uma família quadri-paramétrica de extensões auto-adjuntas do hamiltoniano de Dirac em uma dimensão espacial no intervalo finito e foram calculadas explicitamente a forma das condições de contorno que descrevem essa família. Agora, vamos aplicá-las ao problema de autovalores e obter uma forma para a equação do espectro de energia para cada extensão auto-adjunta. Com base na Eq. (3.2.3) podemos escrever

$$-i\alpha\partial_x\psi + m\beta\psi = \varepsilon\psi, \quad (3.3.1)$$

onde,  $\varepsilon$  denota auto-valores de energia da partícula. A solução da Eq. (3.3.1) é dada por

$$\psi = a u_+ e^{-ipx} + b u_- e^{ipx}, \quad (3.3.2)$$



onde  $u_+$  e  $u_-$  são spinores constantes de duas componentes que vão depender da representação das matrizes  $\alpha, \beta$ , e que de forma genérica podemos expressá-los como

$$u_+ = \begin{pmatrix} u_{+1} \\ u_{+2} \end{pmatrix}, \quad u_- = \begin{pmatrix} u_{-1} \\ u_{-2} \end{pmatrix}.$$

Nos extremos  $x = 0$  e  $x = L$  a Eq. (3.3.2) fornece

$$\psi(0) = \begin{pmatrix} \phi(0) \\ \chi(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} au_{+1} + bu_{-1} \\ au_{+2} + bu_{-2} \end{pmatrix}, \quad \psi(L) = \begin{pmatrix} \phi(L) \\ \chi(L) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} au_{+1}e^{-ipL} + bu_{-1}e^{ipL} \\ au_{+2}e^{-ipL} + bu_{-2}e^{ipL} \end{pmatrix}. \quad (3.3.3)$$

Inserindo a Eq. (3.3.3) nas condições de contorno (3.2.48), obtemos o seguinte sistema de equações lineares para as incógnitas  $a$  e  $b$ :

$$\begin{cases} (\rho e^{i\varphi} u_{+2} + \kappa e^{i\eta} e^{-ipL} u_{+1} - e^{-i\theta} u_{+1})a + (\rho e^{i\varphi} u_{-2} + \kappa e^{i\eta} e^{ipL} u_{-1} - e^{-i\theta} u_{-1})b = 0 \\ (\rho e^{-i\varphi} e^{-ipL} u_{+1} - \kappa e^{-i\eta} u_{+2} - e^{-i\theta} e^{-ipL} u_{+2})a + (\rho e^{-i\varphi} e^{ipL} u_{-1} - \kappa e^{-i\eta} u_{-2} - e^{-i\theta} e^{ipL} u_{-2})b = 0 \end{cases} \quad (3.3.4)$$

ou na sua forma matricial

$$M \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.3.5)$$

onde  $M$  é a matriz principal do sistema, i.e, a matriz dos coeficientes das incógnitas:

$$M = \begin{pmatrix} \rho e^{i\varphi} u_{+2} + \kappa e^{i\eta} e^{-ipL} u_{+1} - e^{-i\theta} u_{+1} & \rho e^{i\varphi} u_{-2} + \kappa e^{i\eta} e^{ipL} u_{-1} - e^{-i\theta} u_{-1} \\ \rho e^{-i\varphi} e^{-ipL} u_{+1} - \kappa e^{-i\eta} u_{+2} - e^{-i\theta} e^{-ipL} u_{+2} & \rho e^{-i\varphi} e^{ipL} u_{-1} - \kappa e^{-i\eta} u_{-2} - e^{-i\theta} e^{ipL} u_{-2} \end{pmatrix}.$$

Sabemos da Álgebra Linear, que para esse sistema ter solução não trivial para os coeficientes  $a, b$  é exigido que o determinante do sistema seja nulo:

$$\Phi(p) = \begin{vmatrix} \rho e^{i\varphi} u_{+2} + \kappa e^{i\eta} e^{-ipL} u_{+1} - e^{-i\theta} u_{+1} & \rho e^{i\varphi} u_{-2} + \kappa e^{i\eta} e^{ipL} u_{-1} - e^{-i\theta} u_{-1} \\ \rho e^{-i\varphi} e^{-ipL} u_{+1} - \kappa e^{-i\eta} u_{+2} - e^{-i\theta} e^{-ipL} u_{+2} & \rho e^{-i\varphi} e^{ipL} u_{-1} - \kappa e^{-i\eta} u_{-2} - e^{-i\theta} e^{ipL} u_{-2} \end{vmatrix} = 0. \quad (3.3.6)$$

A função característica  $\Phi(p)$  determina a equação do espectro de energia e suas raízes correspondem aos autovalores de energia. Após expandir o determinante (3.3.6), bem como utilizando as relações  $\rho^2 + \kappa^2 = 1$ ,  $2i \sin z = e^{iz} - e^{-iz}$ , e com algumas manipulações algébricas, obtemos

$$\begin{cases} 0 = e^{ipL} [(u_{+2}u_{-1})e^{i\theta} + (u_{+1}u_{-2})e^{-i\theta}] - e^{-ipL} [(u_{+1}u_{-2})e^{i\theta} + (u_{+2}u_{-1})e^{-i\theta}] + \\ + 2i\kappa \sin(\eta)(u_{+2}u_{-1} - u_{+1}u_{-2}) - 2i\rho \sin(pL) [(u_{+2}u_{-2})e^{i\varphi} + (u_{+1}u_{-1})e^{-i\varphi}] = \Phi(p). \end{cases} \quad (3.3.7)$$

Neste momento, precisamos da forma explicita dos spinores constantes  $u_{\pm}$ . Utilizando a representação em que  $\alpha = \sigma_3$  e  $\beta = \sigma_2$ . Mostra-se na Ref. [43], que nessa representação os spinores constantes  $u_{\pm}$  assumem a forma :

$$u_+ = \begin{pmatrix} u_{+1} \\ u_{+2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon + m - p \\ i(\varepsilon + m + p) \end{pmatrix}, \quad u_- = \begin{pmatrix} u_{-1} \\ u_{-2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon + m + p \\ i(\varepsilon + m - p) \end{pmatrix}. \quad (3.3.8)$$

Utilizando a relação de energia-momento  $\varepsilon^2 = p^2 + m^2$  e um pouco de álgebra, segue que

$$\begin{aligned} u_{+2}u_{-1} &= i(\varepsilon + m + p)^2, \quad u_{+1}u_{-2} = i(\varepsilon + m - p)^2, \quad u_{+2}u_{-1} - u_{+1}u_{-2} = 4ip(\varepsilon + m), \\ u_{+2}u_{-2} &= -2m(\varepsilon + m), \quad u_{+1}u_{-1} = 2m(\varepsilon + m). \end{aligned} \quad (3.3.9)$$

Inserindo a Eq. (3.3.9) na Eq. (3.3.7) e utilizando as relações trigonometricas complexas  $2 \cos z = e^{iz} + e^{-iz}$ ,  $2i \sin z = e^{iz} - e^{-iz}$ , a relação de energia momento, e simplificando os cálculos, obtemos finalmente a equação que determina o espectro:

$$\Phi(p) = 0, \quad \Phi(p) = (m\rho \sin \varphi + \varepsilon \cos \theta) \sin(pL) + p \sin \theta \cos(pL) + p\kappa \sin \eta. \quad (3.3.10)$$

Note que o espectro não muda sob a mudança dos parâmetros  $\theta \rightarrow \theta - \pi$ ,  $\varphi \rightarrow -\varphi$ ,  $\eta \rightarrow -\eta$ .

Vejamos alguns casos particulares a respeito da Eq. (3.3.10) que define o espectro de energia:

- Condições de contorno periódicas  $U = \sigma_1$  que corresponde aos valores dos parâmetros :  $\kappa = 1$  ( $\rho = 0$ ),  $\theta = -\eta = \pm\pi/2$ , o espectro é  $p_n L = 2\pi n$ .
- Condições de contorno anti-periódicas  $U = -\sigma_1$  que corresponde aos valores dos parâmetros :  $\kappa = 1$  ( $\rho = 0$ ),  $\theta = \eta = \pm\pi/2$ , o espectro é  $p_n L = \pi(2n + 1)$ .
- Condições de contorno MIT  $U = -\sigma_3$ , que pode ser encontrado na Ref. [54], que corresponde aos valores dos parâmetros  $\rho = 1$  ( $\kappa = 0$ ),  $\theta = \pi/2$ ,  $\varphi = \pi/2$ . O espectro é definido pela equação:

$$m \sin(pL) + p \cos(pL) = 0. \quad (3.3.11)$$

- Condições de contorno MIT generalizadas, que pode ser encontrado na Ref. [55], que corresponde aos valores dos parâmetros  $\rho = 1$  ( $\kappa = 0$ ). O espectro é definido pela equação:

$$(m \sin \varphi + \varepsilon \cos \theta) \sin(pL) + p \sin \theta \cos(pL) = 0. \quad (3.3.12)$$

- O espectro é dito regular quando tem a simples forma  $p_n L = n\pi$  e onde

$$U = \pm \begin{pmatrix} \rho e^{i\varphi} & \kappa s_0 \\ -\kappa s_0 & \rho e^{-i\varphi} \end{pmatrix}, \quad s_0 = \pm 1, \forall \rho, \varphi \quad (3.3.13)$$

que corresponde aos valores dos parâmetros:  $\theta = 0, \pi; \eta = 0, \pi$ . O espectro tem a forma  $p_n L = \pi(n + 1/2)$  quando

$$U = \pm i \begin{pmatrix} \rho s_1 & \kappa s_2 \\ -\kappa s_2 & \rho s_1 \end{pmatrix}, \quad s_1 = \pm 1, s_2 = \pm 1, \forall \rho. \quad (3.3.14)$$

Agora vamos discutir a especificidade do problema que consiste na existência de estados com energia menor do que a energia de repouso. Consideramos o caso  $0 < \varepsilon < m$ . A mudança  $p = iq$  na Eq. (3.3.10) produz a seguinte equação do espectro de energia

$$\Phi(q) = 0, \quad \Phi(q) = (m\rho \sin \varphi + \tilde{\varepsilon} \cos \theta) \sinh(qL) + q \sin \theta \cosh(qL) + q\kappa \sin \eta, \quad (3.3.15)$$

onde neste caso  $0 < q < m$  e a relação de energia-momento em termos da nova variável  $q$  assume a forma:  $\tilde{\varepsilon} = \sqrt{m^2 - q^2}$ . Neste caso, vemos que a equação transcendental (3.3.15) tem soluções e podemos construir graficamente a dependência da energia com os parâmetros de extensões se dividirmos em alguns exemplos de famílias bi-paramétricas.

Exemplo 1: Escolhemos  $\rho = 1$  ( $\kappa = 0$ ). Neste caso, não temos dependência em  $\eta$ , e variamos nos parâmetros  $\theta$  e  $\varphi$  e portanto a matriz unitária  $U$  e a Eq. (3.3.15) assumem a forma respectivamente por:

$$U = \begin{pmatrix} e^{i(\theta+\varphi)} & 0 \\ 0 & e^{i(\theta-\varphi)} \end{pmatrix}, \quad (3.3.16)$$

$$(m \sin \varphi + \tilde{\varepsilon} \cos \theta) \sinh(qL) + q \sin \theta \cosh(qL) = 0. \quad (3.3.17)$$

A energia para esse caso é demonstrada na Fig. (3.1)

Exemplo 2: Neste caso, na Eq. (3.3.15) atribuímos valores  $\rho = 0.9$  e  $\theta = 0.75$  e analisamos a dependência da energia com os parâmetros  $\eta$  e  $\varphi$ . A energia para esse caso é demonstrada na Fig. (3.2)

Vale evidenciar que não desprevermos a análise para o caso da antipartícula. Contudo, para esta análise o procedimento pode ser feito de forma semelhante mediante as substituições  $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$  e  $p \rightarrow -p$ .

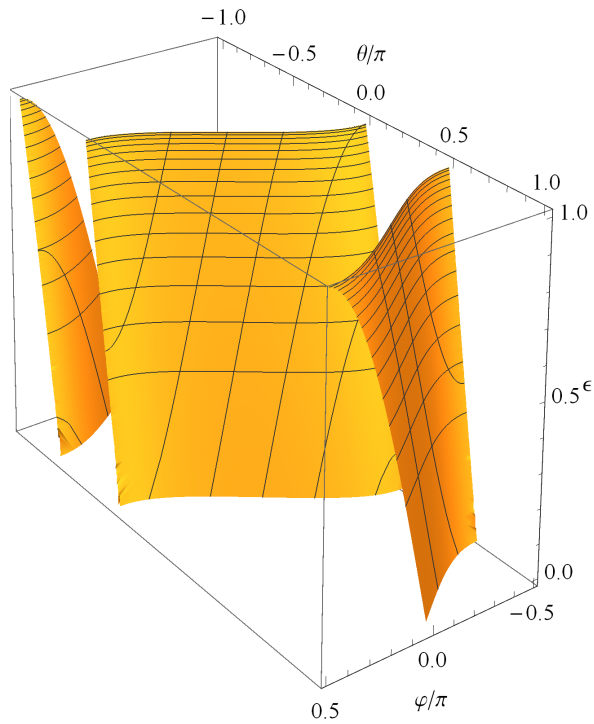


Figura 3.1: Energia com valores menor da energia de repouso em dependência dos parâmetros  $\theta$  e  $\varphi$ . Ilustração do exemplo 1.

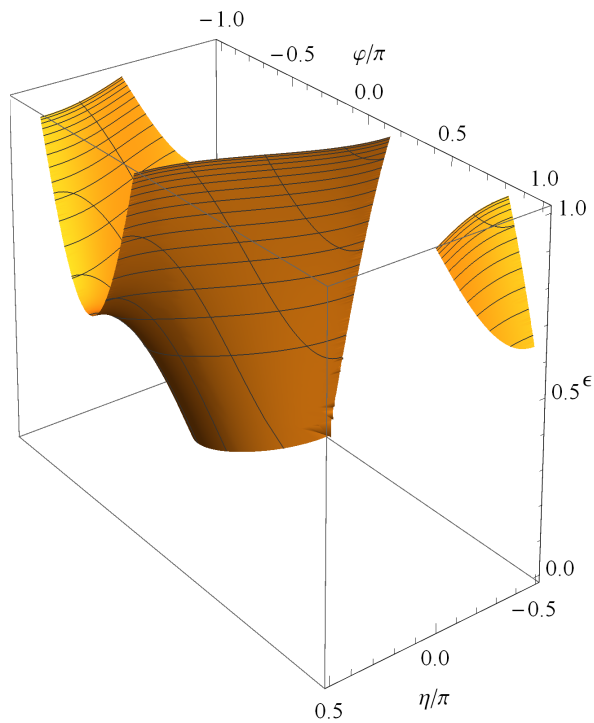


Figura 3.2: Energia com valores menor da energia de repouso em dependência dos parâmetros  $\eta$  e  $\varphi$ . Ilustração do exemplo 2.

### 3.3.2 Forma Explícita das Autofunções

Até o momento, através da teoria de von Neumann, provamos que existe uma família quadri-paramétrica de extensões auto-adjuntas, e através do formalismo AIM fomos capazes de descrever explicitamente a forma das condições de contorno gerais que nos a uma família de hamiltonianos de Dirac auto-adjuntos. Em síntese o operador

$$H_{D_U} : \mathcal{D}_{H_{D_U}} \rightarrow \mathcal{H}$$

$$\psi \mapsto -i\alpha\partial_x\psi + m\beta\psi$$

com o domínio  $\mathcal{D}_{H_{D_U}}$  dado por

$$\mathcal{D}_{H_{D_U}} = \left\{ \psi(x) \in \mathcal{H} : \begin{pmatrix} \phi(0) \\ \chi(L) \end{pmatrix} = e^{i\theta} \begin{pmatrix} \rho e^{i\varphi} \chi(0) + \kappa e^{i\eta} \phi(L) \\ -\kappa e^{-i\eta} \chi(0) + \rho e^{-i\varphi} \phi(L) \end{pmatrix} \right\}, \text{ é auto-adjunto.}$$
(3.3.18)

Através dessas caracterizações fomos capazes de determinar a equação que define o espectro de energia expressa pela Eq. (3.3.10). Estamos agora aptos a determinar a forma explícita do conjunto de autofunções em termos da família quadri-paramétrica  $(\rho, \varphi, \eta, \theta)$ . Com base na Eq. (3.3.4) podemos determinar a relação entre os coeficientes  $a$  e  $b$ , em termos da família quadri-paramétrica  $(\rho, \varphi, \eta, \theta)$  por

$$a_n = i\rho(\varepsilon_n + m - p_n)e^{i(\varphi+\theta)} + (\varepsilon_n + m + p_n)(\kappa e^{i(\eta+\theta)}e^{ip_nL} - 1),$$

$$b_n = -i\rho(\varepsilon_n + m + p_n)e^{i(\varphi+\theta)} - (\varepsilon_n + m - p_n)(\kappa e^{i(\eta+\theta)}e^{-ip_nL} - 1).$$
(3.3.19)

Os spinores constantes  $u_{\pm}$  agora assumem a forma:

$$u_{\pm} = \begin{pmatrix} \varepsilon_n + m \mp p_n \\ i(\varepsilon_n + m \pm p_n) \end{pmatrix},$$
(3.3.20)

pela Eq. (3.3.10) que determina o espectro de energia, e da Eq. (3.3.19) que determina a relação entre os coeficientes  $a, b$ , podemos caracterizar as autofunções  $\psi_n$  e os autovalores de energia  $\varepsilon_n$  em termos da família quadri-paramétrica  $(\rho, \varphi, \eta, \theta)$  por:

$$\psi_n(x) = a_n u_+ e^{-ip_n x} + b_n u_- e^{ip_n x}, \quad \varepsilon_n = \sqrt{m^2 + p_n^2},$$
(3.3.21)

onde os  $p_n$  são as raízes da função característica  $\Phi(p) = (m\rho \sin \varphi + \varepsilon \cos \theta) \sin(pL) + p \sin \theta \cos(pL) + p\kappa \sin \eta = 0$  e

$$\psi_q(x) = a_q \tilde{u}_+ e^{qx} + b_q \tilde{u}_- e^{-qx}, \quad \tilde{\varepsilon} = \sqrt{m^2 - q^2}$$
(3.3.22)

onde  $q$  são raízes da equação  $\Phi(q) = (m\rho \sin \varphi + \tilde{\varepsilon} \cos \theta) \sinh(qL) + q \sin \theta \cosh(qL) + q\kappa \sin \eta = 0$ , os spinores constantes  $u_{\pm}$  neste caso assumem a forma

$$\tilde{u}_{\pm} = \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon} + m \mp iq \\ i(\tilde{\varepsilon} + m \pm iq) \end{pmatrix} \quad (3.3.23)$$

e a relação entre os coeficientes  $a$  e  $b$  fica representada por

$$\begin{aligned} a_q &= i\rho(\tilde{\varepsilon} + m - iq)e^{i(\varphi+\theta)} + (\tilde{\varepsilon} + m + iq)(\kappa e^{i(\eta+\theta)}e^{-qL} - 1), \\ b_q &= -i\rho(\tilde{\varepsilon} + m + iq)e^{i(\varphi+\theta)} - (\tilde{\varepsilon} + m - iq)(\kappa e^{i(\eta+\theta)}e^{qL} - 1). \end{aligned} \quad (3.3.24)$$

Para os estados com  $0 < \varepsilon < m$  vamos construir a densidade de probabilidade  $\rho = \psi_q^\dagger \psi_q$ . Através das Eqs. (3.3.22), (3.3.23), (3.3.24) e utilizando as relações relativísticas

$$\begin{aligned} \tilde{u}_+^\dagger \tilde{u}_+ &= 4m(\tilde{\varepsilon} + m), \quad \tilde{u}_-^\dagger \tilde{u}_- = 4m(\tilde{\varepsilon} + m) \\ \tilde{u}_+^\dagger \tilde{u}_- &= 4\tilde{\varepsilon}(\tilde{\varepsilon} + m), \quad \tilde{u}_-^\dagger \tilde{u}_{+-} = 4\tilde{\varepsilon}(\tilde{\varepsilon} + m) \end{aligned}$$

segue que

$$\rho(x) = \psi_q^\dagger(x) \psi_q(x) = 4m(\tilde{\varepsilon} + m)(|a_q|^2 e^{2qx} + |b_q|^2 e^{-2qx}) + 4\tilde{\varepsilon}(\tilde{\varepsilon} + m)(a_q^* b_q + b_q^* a_q) \quad (3.3.25)$$

onde

$$|a_q|^2 = q^2 \rho^2 - q\rho(\tilde{\varepsilon} + m)(2\kappa e^{-qL} \cos(\eta - \varphi) - 2 \cos(\varphi + \theta)) + (\tilde{\varepsilon} + m)^2 (\kappa^2 e^{-2qL} - 2\kappa e^{-qL} \cos(\eta + \theta) + 1) \quad (3.3.26)$$

$$|b_q|^2 = q^2 \rho^2 + q\rho(\tilde{\varepsilon} + m)(2\kappa e^{qL} \cos(\eta - \varphi) - 2 \cos(\varphi + \theta)) + (\tilde{\varepsilon} + m)^2 (\kappa^2 e^{2qL} - 2\kappa e^{qL} \cos(\eta + \theta) + 1) \quad (3.3.27)$$

$$a_q^* b_q + b_q^* a_q = 2q^2 \rho^2 + q\rho(\tilde{\varepsilon} + m)(4\kappa \sinh(qL) \cos(\eta - \varphi)) - (\tilde{\varepsilon} + m)^2 (2\kappa^2 - 4\kappa \cosh(qL) \cos(\eta + \theta) + 2) \quad (3.3.28)$$

onde utilizamos as relações  $2 \cosh x = e^x + e^{-x}$ ,  $2 \sinh x = e^x - e^{-x}$ . Com um pouco de álgebra, fatorando os termos comuns e simplificando os cálculos, obtemos

$$\begin{aligned} \rho(x) &= 4m(\tilde{\varepsilon} + m) [(2q^2 \rho^2 \cosh(2qx) - q\rho(\tilde{\varepsilon} + m)((4\kappa \sinh(q(2x - L))) \cos(\eta - \varphi) + \\ &\quad - 4 \sinh(2qx) \cos(\varphi + \theta)) + (\tilde{\varepsilon} + m)^2 (2\kappa^2 \cosh(2q(x - L)) + \\ &\quad - 4\kappa \cos(\eta + \theta) \cosh(q(2x + L) + 2 \cosh(2qx))] + \\ &\quad + 4\tilde{\varepsilon}(\tilde{\varepsilon} + m) [2q^2 \rho^2 + q\rho(\tilde{\varepsilon} + m)(4\kappa \sinh(qL) \cos(\eta - \varphi)) + \\ &\quad - (\tilde{\varepsilon} + m)^2 (2\kappa^2 - 4\kappa \cosh(qL) \cos(\eta + \theta) + 2)]. \end{aligned} \quad (3.3.29)$$

Demonstramos graficamente exemplos do comportamento da densidade de probabilidade  $\rho(x)$  com os parâmetros de extensão na Fig. (3.3) e na Fig. (3.4) que correspondem aos exemplos 1, 2 respectivamente representados no final da seção 3.3.1. Nos gráficos vemos que o máximo de  $\rho(x)$  é localizado na extremidade. Os estados com este comportamento foram discutidos na Ref. [39] e foram chamados de "edge states".

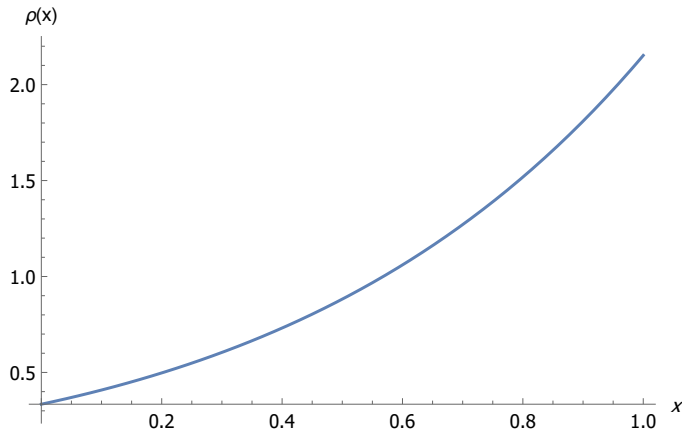


Figura 3.3: Densidade de probabilidade  $\rho(x)$  dos parâmetros  $\rho = 1$ ,  $\theta = 0.75\pi$ ,  $\varphi = -0.75\pi$ ,  $q = 0.8$ .

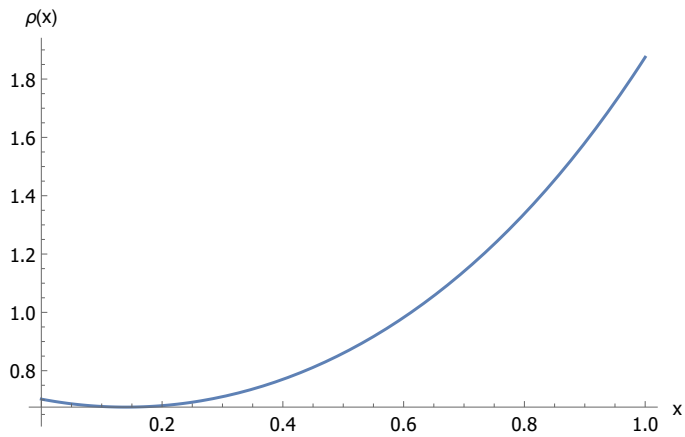


Figura 3.4: Densidade de probabilidade  $\rho(x)$  dos parâmetros  $\rho = 0.9$ ,  $\theta = 0.75\pi$ ,  $\varphi = 0.5\pi$ ,  $\eta = 0.25\pi$ ,  $q = 0.8$ .

### 3.3.3 Ortogonalidade do Conjunto das Autofunções

Nesta seção, vamos provar que o conjunto de autofunções para autovalores distintos do operador auto-adjunto  $H_{DU}$  no domínio  $\mathcal{D}_{H_{DU}}$  são ortogonais. Ou seja,

$$\langle \psi_n, \psi_m \rangle = \int_0^L dx \psi_n^\dagger \psi_m = 0, \quad \forall n \neq m. \quad (3.3.30)$$

Por conveniência, vamos adotar a representação dos spinores constantes de duas componentes da seguinte forma

$$u_+ = (\gamma^0 \varepsilon + \gamma^1 p + m)u_0, \quad u_- = (\gamma^0 \varepsilon - \gamma^1 p + m)u_0, \quad u_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.3.31)$$

onde  $\gamma^0 = \beta$  e  $\gamma^1 = \beta\alpha$  são matrizes de Dirac. Sendo  $\gamma^0 u_0 = u_0$ , as autofunções dadas pela Eq. (3.3.21) assumem a forma

$$\psi_n = a_n(\varepsilon_n + m + \gamma^1 p_n)u_0 e^{-ip_n x} + b_n(\varepsilon_n + m - \gamma^1 p_n)u_0 e^{ip_n x} \quad (3.3.32)$$

levando em consideração que  $(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0$  e  $(\gamma^1)^\dagger = -\gamma^1$  a hermitiano conjugado da Eq. (3.3.32) fica dada por

$$\psi_n^\dagger = a_n^* u_0^\dagger (\varepsilon_n + m - \gamma^1 p_n) e^{-ip_n x} + b_n^* u_0^\dagger (\varepsilon_n + m + \gamma^1 p_n) e^{ip_n x} \quad (3.3.33)$$

Sendo  $u_0^\dagger u_0 = 1$  e  $u_0^\dagger \gamma^1 u_0 = 0$ , o produto  $\psi_n \psi_m$  pode ser expresso da seguinte forma

$$\begin{aligned} \psi_n^\dagger \psi_m &= ((\varepsilon_n + m)(\varepsilon_m + m) + p_n p_m) a_n^* a_m e^{i(p_n - p_m)x} \\ &\quad + ((\varepsilon_n + m)(\varepsilon_m + m) - p_n p_m) a_n^* b_m e^{i(p_n + p_m)x} \\ &\quad + ((\varepsilon_n + m)(\varepsilon_m + m) - p_n p_m) b_n^* a_m e^{-i(p_n + p_m)x} \\ &\quad + ((\varepsilon_n + m)(\varepsilon_m + m) + p_n p_m) b_n^* b_m e^{-i(p_n - p_m)x} \end{aligned} \quad (3.3.34)$$

integrando de 0 a  $L$  a Eq. (3.3.34), cuja integral é da forma

$$\int_0^L dx e^{\delta x} = \frac{1}{\delta} (e^{\delta L} - 1) \quad (3.3.35)$$

segue que

$$\begin{aligned} \int_0^L dx \psi_n^\dagger \psi_m &= \frac{(\varepsilon_n + m)(\varepsilon_m + m) + p_n p_m}{i(p_n - p_m)} \left( a_n^* a_m (e^{i(p_n - p_m)L} - 1) - b_n^* b_m (e^{-i(p_n - p_m)L} - 1) \right) \\ &\quad + \frac{(\varepsilon_n + m)(\varepsilon_m + m) - p_n p_m}{i(p_n + p_m)} \left( a_n^* b_m (e^{i(p_n + p_m)L} - 1) - b_n^* a_m (e^{-i(p_n + p_m)L} - 1) \right) \end{aligned} \quad (3.3.36)$$



da Eq. (3.3.19) podemos expressar os coeficientes  $a_n^* a_m$ ,  $b_n^* b_m$ ,  $a_n^* b_m$ ,  $b_n^* a_m$  respectivamente por

$$\begin{aligned} a_n^* a_m &= -\rho^2 p_n p_m - i\rho p_m e^{i(\varphi+\theta)} (\varepsilon_n + m) (\kappa e^{-i(\eta+\theta)} e^{-ip_n L} - 1) \\ &\quad - i\rho p_n e^{-i(\varphi+\theta)} (\varepsilon_m + m) (\kappa e^{i(\eta+\theta)} e^{ip_m L} - 1) \\ &\quad + (\varepsilon_n + m) (\varepsilon_m + m) (\kappa e^{-i(\eta+\theta)} e^{-ip_n L} - 1) (\kappa e^{i(\eta+\theta)} e^{ip_m L} - 1) \end{aligned} \quad (3.3.37)$$

$$\begin{aligned} b_n^* b_m &= -\rho^2 p_n p_m + i\rho p_m e^{i(\varphi+\theta)} (\varepsilon_n + m) (\kappa e^{-i(\eta+\theta)} e^{ip_n L} - 1) \\ &\quad + i\rho p_n e^{-i(\varphi+\theta)} (\varepsilon_m + m) (\kappa e^{i(\eta+\theta)} e^{-ip_m L} - 1) \\ &\quad + (\varepsilon_n + m) (\varepsilon_m + m) (\kappa e^{-i(\eta+\theta)} e^{ip_n L} - 1) (\kappa e^{i(\eta+\theta)} e^{-ip_m L} - 1) \end{aligned} \quad (3.3.38)$$

$$\begin{aligned} a_n^* b_m &= \rho^2 p_n p_m - i\rho p_m e^{i(\varphi+\theta)} (\varepsilon_n + m) (\kappa e^{-i(\eta+\theta)} e^{-ip_n L} - 1) \\ &\quad + i\rho p_n e^{-i(\varphi+\theta)} (\varepsilon_m + m) (\kappa e^{i(\eta+\theta)} e^{-ip_m L} - 1) \\ &\quad - (\varepsilon_n + m) (\varepsilon_m + m) (\kappa e^{-i(\eta+\theta)} e^{-ip_n L} - 1) (\kappa e^{i(\eta+\theta)} e^{-ip_m L} - 1) \end{aligned} \quad (3.3.39)$$

$$\begin{aligned} b_n^* a_m &= \rho^2 p_n p_m + i\rho p_m e^{i(\varphi+\theta)} (\varepsilon_n + m) (\kappa e^{-i(\eta+\theta)} e^{ip_n L} - 1) \\ &\quad - i\rho p_n e^{-i(\varphi+\theta)} (\varepsilon_m + m) (\kappa e^{i(\eta+\theta)} e^{ip_m L} - 1) \\ &\quad - (\varepsilon_n + m) (\varepsilon_m + m) (\kappa e^{-i(\eta+\theta)} e^{ip_n L} - 1) (\kappa e^{i(\eta+\theta)} e^{ip_m L} - 1) \end{aligned} \quad (3.3.40)$$

Inserindo as Eqs. (3.3.37), (3.3.38), (3.3.39), (3.3.40) na Eq. (3.3.36), bem como utilizando as relações

$$\rho^2 + \kappa^2 = 1, \quad \sin z = \frac{1}{2}(e^{iz} - e^{-iz}), \quad \cos z = \frac{1}{2}(e^{iz} + e^{-iz})$$

agrupando os termos semelhantes e simplificando obtemos

$$\begin{aligned} I &= \int_0^L dx \psi_n^\dagger \psi_m = 2p_n p_m (\varepsilon_n + m) (\varepsilon_m + m) \sin(\theta + \eta) (\cos(p_n L) - \cos(p_m L)) \\ &\quad + \rho(p_n^2 (\varepsilon_m + m)^2 - p_m^2 (\varepsilon_n + m)^2 \cos(\theta + \varphi) \sin(p_n L) \sin(p_m L) \\ &\quad + \rho\kappa(p_n (\varepsilon_n + m)((\varepsilon_m + m) - p_m^2) \sin(p_m L) - p_m (\varepsilon_n + m)((\varepsilon_n + m)^2 - p_n^2) \sin(p_n L) \sin(\eta - \varphi) \\ &\quad + \kappa(p_m (\varepsilon_m + m)((\varepsilon_n + m)^2 + p_n^2) \sin(p_n L) - p_n (\varepsilon_n + m)((\varepsilon_m + m)^2 + p_m^2) \sin(p_m L) \cos(\theta + \eta) \\ &\quad + p_n (\varepsilon_n + m)((\varepsilon_m + m)^2 + p_m^2) + \rho((\varepsilon_m + m)^2 - p_m^2) \sin(\theta + \varphi)) \cos(p_n L) \sin(p_m L) \\ &\quad - p_m (\varepsilon_m + m)((\varepsilon_n + m)^2 + p_n^2) + \rho((\varepsilon_n + m)^2 - p_n^2) \sin(\theta + \varphi)) \cos(p_m L) \sin(p_n L) \\ &\quad + 2ip_n p_m \rho\kappa(p_m^2 (\varepsilon_n + m) - p_n^2 (\varepsilon_m + m) + (\varepsilon_n + m)(\varepsilon_m + m)(\varepsilon_n - \varepsilon_m) (\cos(p_n L) - \cos(p_m L)) \sin(\eta - \varphi)). \end{aligned} \quad (3.3.41)$$

Utilizando a relação de energia-momento  $\varepsilon^2 = m^2 + p^2$ , obtemos as seguintes relações relativísticas

$$\begin{aligned} (\varepsilon_n + m)^2 + p_n^2 &= 2\varepsilon_n(\varepsilon_n + m), \quad (\varepsilon_n + m)^2 - p_n^2 = 2m(\varepsilon_n + m), \\ (\varepsilon_m + m)^2 + p_m^2 &= 2\varepsilon_m(\varepsilon_m + m), \quad (\varepsilon_m + m)^2 - p_m^2 = 2m(\varepsilon_m + m), \\ p_n^2(\varepsilon_m + m)^2 - p_m^2(\varepsilon_n + m)^2 &= 2m(\varepsilon_n + m)(\varepsilon_m + m)(\varepsilon_n - \varepsilon_m). \end{aligned} \quad (3.3.42)$$

Através da Eq. (3.3.10) que determina o espectro de energia, obtemos a seguinte relação

$$\begin{aligned} p_n p_m (\cos(p_n L) - \cos(p_m L)) \sin \theta &= m \rho \sin \varphi (p_n \sin(p_m L) - p_m \sin(p_n L)) \\ &+ \cos \theta (\varepsilon_m p_n \sin(p_m L) - \varepsilon_n p_m \sin(p_n L)) \end{aligned} \quad (3.3.43)$$

inserindo as Eqs. (3.3.42), (3.3.43) na Eq. (3.3.41) e simplificando segue que

$$\begin{aligned} I &= m \rho \kappa (\sin(\theta + \eta) \sin \varphi + \sin(\eta - \varphi) \sin \theta - \sin(\theta + \varphi) \sin \eta) (p_n \sin(p_m L) - p_m \sin(p_n L)) \\ &+ \kappa (\sin(\theta + \eta) \cos \theta - \cos(\theta + \eta) \sin \theta - \sin \eta) (\varepsilon_m p_n \sin(p_m L) - \varepsilon_n p_m \sin(p_n L)) \\ &+ 2i p_n p_m \rho \kappa (p_m^2(\varepsilon_n + m) - p_n^2(\varepsilon_m + m) + (\varepsilon_n + m)(\varepsilon_m + m)(\varepsilon_n - \varepsilon_m) (\cos(p_n L) - \cos(p_m L)) \sin(\eta - \varphi). \end{aligned} \quad (3.3.44)$$

Para os dois primeiros termos da Eq. (3.3.44), podemos aplicar as formulas de adição e subtração de arcos para senos e cossenos conhecida da trigonometria, para obter

$$\begin{aligned} \sin(\theta + \eta) \sin \varphi + \sin(\eta - \varphi) \sin \theta - \sin(\theta + \varphi) \sin \eta &= 0, \\ \sin(\theta + \eta) \cos \theta - \cos(\theta + \eta) \sin \theta - \sin \eta &= 0, \end{aligned} \quad (3.3.45)$$

e para o terceiro termo da Eq. (3.3.44), usando a relação de energia-momento  $p_m^2 = (\varepsilon_m^2 - m^2)$  e  $p_n^2 = (\varepsilon_n^2 - m^2)$ , segue que

$$\begin{aligned} p_m^2(\varepsilon_n + m) - p_n^2(\varepsilon_m + m) + (\varepsilon_n + m)(\varepsilon_m + m)(\varepsilon_n - \varepsilon_m) &= \\ = (\varepsilon_n + m)(\varepsilon_m + m)(\varepsilon_m - m) - (\varepsilon_n + m)(\varepsilon_m + m)(\varepsilon_n - m) + (\varepsilon_n + m)(\varepsilon_m + m)(\varepsilon_n - \varepsilon_m) \\ = (\varepsilon_n + m)(\varepsilon_m + m)((\varepsilon_m - \varepsilon_n) + (\varepsilon_n - \varepsilon_m)) &= 0. \end{aligned} \quad (3.3.46)$$

Portanto, chegamos ao resultado

$$I = \int_0^L dx \psi_n^\dagger \psi_m = 0. \quad (3.3.47)$$

Consequentemente, o conjunto de autofunções da família quadri-paramétrica de hamiltonianos auto-adjuntos é ortogonal no espaço de Hilbert  $\mathcal{H} = L^2(0, L) \oplus L^2(0, L)$ . De forma semelhante, chegamos ao resultado  $\langle \psi_n, \psi_q \rangle = 0$ .

### 3.3.4 Completeza do Conjunto das Autofunções

Considere o problema de valor de contorno gerado no intervalo  $(0, \pi)$  pela equação de Dirac

$$By'(x) + \Omega(x)y(x) = \lambda y(x) \quad (3.3.48)$$

sujeita as condições de contorno

$$\Gamma(y) = A_0y(0) + A_1y(\pi) = 0, \quad (3.3.49)$$

onde

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Omega(x) = \begin{pmatrix} p(x) & r(x) \\ r(x) & -p(x) \end{pmatrix}, \quad A_0 = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad A_1 = \begin{pmatrix} a_{13} & a_{14} \\ a_{23} & a_{24} \end{pmatrix}, \quad (3.3.50)$$

$p(x)$ ,  $r(x)$  são funções com valores complexos no espaço de Hilbert das funções somáveis, e os coeficientes  $a_{ik}$  são números complexos arbitrários. Nosso objetivo é apresentar um esquema de prova da completeza de autofunções e funções associadas do problema de valores de contorno (3.3.48), (3.3.49) baseado na Ref. [40]. Neste caso sobre a equação de Dirac (3.3.48), o espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  se decompõe em soma direta:  $\mathcal{H} = L^2(0, \pi) \oplus L^2(0, \pi)$ . Onde  $L^2(0, \pi)$  é o espaço de Hilbert das funções quadrado-integráveis no intervalo  $(0, \pi)$ .

**Esquema de prova da completeza:** Inicialmente, precisamos determinar as autofunções e funções associadas do problema (3.3.48), (3.3.49). Considere

$$\psi(\lambda, x) = \begin{pmatrix} \psi_{11}(\lambda, x) & \psi_{12}(\lambda, x) \\ \psi_{21}(\lambda, x) & \psi_{22}(\lambda, x) \end{pmatrix}, \quad (3.3.51)$$

solução fundamental da Eq. (3.3.48). Ou seja,  $\psi(\lambda, x)$  satisfaz a equação diferencial

$$B\psi'(\lambda, x) + \Omega(x)\psi(\lambda, x) = \lambda\psi(\lambda, x), \quad (3.3.52)$$

normalizada pela condição inicial  $\psi(\lambda, 0) = I$ , onde  $I$  denota a matriz identidade  $2 \times 2$ . Assim, podemos denotar a solução geral de (3.3.48) por  $\psi(\lambda, x)C$  onde  $C$  é uma matriz constante arbitrária  $2 \times 1$ . Com posse disso, podemos escrever as condições de contorno (3.3.49) para  $\psi(\lambda, x)$  por

$$\Gamma(\psi(\lambda, x)) = A_0\psi(\lambda, 0) + A_1\psi(\lambda, \pi) = A_0 + A_1\psi(\lambda, \pi) = 0 \quad (3.3.53)$$

Consequentemente, os autovalores do problema em questão coincidem com as raízes da função característica  $P(\lambda) = \text{Det}(A_0 + A_1\psi(\lambda, \pi))$ .

$$P(\lambda) = \begin{vmatrix} a_{11} + a_{13}\psi_{11}(\lambda, \pi) + a_{14}\psi_{21}(\lambda, \pi) & a_{12} + a_{13}\psi_{12}(\lambda, \pi) + a_{14}\psi_{22}(\lambda, \pi) \\ a_{21} + a_{23}\psi_{11}(\lambda, \pi) + a_{24}\psi_{21}(\lambda, \pi) & a_{22} + a_{23}\psi_{12}(\lambda, \pi) + a_{24}\psi_{22}(\lambda, \pi) \end{vmatrix} = 0. \quad (3.3.54)$$

Calculamos  $\text{Det } \psi(\lambda, x) = 1$  e após expandirmos o determinante (3.3.54), podemos expressá-lo da seguinte forma:

$$P(\lambda) = J_{12} + J_{34} + J_{32}\psi_{11} + J_{13}\psi_{12} + J_{42}\psi_{21} + J_{14}\psi_{22} \quad (3.3.55)$$

onde  $\psi_{ik} = \psi_{ik}(\lambda, \pi)$  é a  $ik$ -ésima entrada da matriz  $\psi(\lambda, \pi)$ , e  $J_{\alpha\beta} = a_{1\alpha}a_{2\beta} - a_{2\alpha}a_{1\beta}$ .

Sejam  $\tilde{\Gamma}$ ,  $\tilde{A}_0$ ,  $\tilde{A}_1$  matrizes geradas pelos cofatores da matriz  $\Gamma = A_0 + A_1\psi(\lambda, \pi)$ ,  $A_0$ ,  $A_1$  respectivamente. Vamos construir a seguinte solução da Eq. (3.3.48) :

$$\omega(\lambda, x) = \psi(\lambda, x)\tilde{\Gamma}. \quad (3.3.56)$$

Com essa construção, vemos que a solução  $\omega$  satisfaz as condições de contorno, isto é

$$\omega(\lambda, x) = \psi(\lambda, x)\tilde{A}_0 + \psi_\pi(\lambda, x)\tilde{A}_1, \quad A_0\omega(\lambda, 0) + A_1\omega(\lambda, \pi) = P(\lambda)I, \quad (3.3.57)$$

onde  $\psi_\pi(\lambda, x) = \psi(\lambda, x)[\psi(\lambda, \pi)]^{-1}$ .

A seguir, vamos caracterizar as autofunções e funções associadas. Um autovalor  $\lambda_n$  do problema de valor de contorno (3.3.48), (3.3.49), é dito ter multiplicidade  $p$  se  $\lambda_n$  é uma raiz de multiplicidade  $p$  da função característica  $P(\lambda)$ . Se  $\lambda_n$  é uma raiz de multiplicidade  $p$  da função característica  $P(\lambda)$ , então as matrizes

$$\omega_k(x) = \frac{1}{k!} \frac{\partial^k}{\partial \lambda^k} \omega(\lambda, x)|_{\lambda=\lambda_n}, \quad (k = 0, 1, \dots, p-1) \quad (3.3.58)$$

satisfazem as condições de contorno  $A_0\omega_k(0) + A_1\omega_k(\pi)$  e as equações  $B\omega'_k + \Omega(x)\omega_k = \lambda_n\omega_k + \omega_{k-1}$ , ou seja, elas formam uma cadeia de autofunções matriciais  $\omega_k(x)$  e funções matriciais associadas. Então, para provar a completeza do sistema de autofunções matriciais e funções matriciais associadas no espaço  $\mathcal{H}$ , é suficiente verificar que para  $f(x) \in \mathcal{H}$ , a matriz  $[P(\lambda)]^{-1} \int_0^\pi dx f(x)\omega(\lambda, x)$  não pode ser uma função inteira de  $\lambda$  a não ser que a função matricial  $f$  se anule em quase todo o espaço. Em sequência, é necessário impormos restrições sobre as condições de contorno do problema. Para isso, precisamos procurar uma representação integral da solução  $\psi(\lambda, x)$  da Eq. (3.3.48), sujeita a condição inicial

$\psi(\lambda, 0) = I$ . A Eq. (3.3.48) pode ser reescrita na forma [40]

$$\psi(\lambda, x) = e^{-B\lambda x} + \int_{-x}^x dt K(x, t) e^{-B\lambda t}, \quad (3.3.59)$$

onde o núcleo  $K(x, t)$  pertence ao espaço de Hilbert  $\mathcal{BH}$  e satisfaz a desigualdade

$$\int_{-x}^x dt |K(x, t)| \leq e^{\xi(x)} - 1, \quad \xi(x) = \int_0^{|x|} dt |\Omega(t)|. \quad (3.3.60)$$

Fazendo  $\Omega(x) \equiv 0$  na Eq. (3.3.48), obtemos a equação  $B\psi'(\lambda, x) = \lambda\psi(\lambda, x)$ . A ideia é utilizar a representação integral (3.3.59) em razão dela preservar as condições iniciais no ponto  $x = 0$ , isto é, transforma qualquer solução dessa equação com  $\Omega(x) \equiv 0$  em solução da Eq. (3.3.48) com as mesmas condições iniciais em  $x = 0$ . Podemos expressar a Eq. (3.3.59) do seguinte modo:

$$\begin{aligned} \psi(\lambda, x) &= e^{-B\lambda x} + \int_{-x}^x dt K(x, t) e^{-B\lambda t} \\ &= e^{-B\lambda x} + \int_0^x dt (K(x, t) + K(x, -t)) e^{-B\lambda t} \\ &= e^{-B\lambda x} + \int_0^x dt \tilde{K}(x, t) e^{-B\lambda t}, \end{aligned}$$

onde  $\tilde{K}(x, t) = K(x, t) - K(x, -t)$ . Como  $B^2 = -I$ , podemos utilizar a seguinte identidade envolvendo exponencial de matrizes :  $e^{-B\lambda x} = I \cos \lambda x - B \sin \lambda x$ . Portanto, a solução geral de (3.3.48) para  $\Omega(x) \equiv 0$  fica representada por

$$\psi(\lambda, x) = \begin{pmatrix} \cos \lambda x & -\sin \lambda x \\ \sin \lambda x & \cos \lambda x \end{pmatrix} + \int_0^x dt \tilde{K}(x, t) \begin{pmatrix} \cos \lambda t & -\sin \lambda t \\ \sin \lambda t & \cos \lambda t \end{pmatrix}, \quad (3.3.61)$$

com  $\tilde{K}(x, t) = \tilde{K}_{ij}(x, t)$ . A partir das soluções (3.3.61), podemos expressar a função característica  $P_0(\lambda)$  associada ao problema de valor de contorno quando  $\Omega(x) \equiv 0$  por

$$P_0(\lambda) = J_{12} + J_{34} + (J_{14} + J_{32}) \cos \lambda \pi + (J_{13} + J_{42}) \sin \lambda \pi. \quad (3.3.62)$$

Usando as soluções da Eq. (3.3.48) em termos das suas representações integrais (3.3.61), e o Lemma. (1.3.1) da Ref. [40] obtemos a estimativa

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |P(\lambda) - P_0(\lambda)| = o(e^{|\operatorname{Im} \lambda \pi|}), \quad (3.3.63)$$

onde  $P_0(\lambda)$  é dada pela Eq. (3.3.62). Se

$$(J_{14} + J_{32})^2 + (J_{13} + J_{42})^2 \neq 0, \quad (3.3.64)$$

existe uma sequência de contornos expansíveis não limitados no qual  $|P_0(\lambda)|$ , e portanto  $|P(\lambda)|$  também, é maior que  $Ce^{|\operatorname{Im} \lambda \pi|}$ . Tendo em vista o Teorema. (1.3.1) da Ref. [40] a prova da completeza fica determinada de forma semelhante. Contudo, se a Eq. (3.3.64) não é satisfeita, a completeza falha até mesmo quando  $\Omega(x) \equiv 0$ .

A seguir, vamos aplicar o esquema de prova da completeza para o caso das condições de contorno auto-adjuntas. As condições de contorno (3.3.49) assumem a forma :

$$\Gamma(\psi(x)) = A_0\psi(0) + A_1\psi(L) = 0, \quad x \in (0, L). \quad (3.3.65)$$

Utilizando a definição do spinor de duas componentes  $\psi(x)$  e a definição das matrizes  $A_0, A_1$  dadas pela Eq. (3.3.50), segue que as condições de contorno podem ser expressas por

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi(0) \\ \chi(0) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_{13} & a_{14} \\ a_{23} & a_{24} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi(L) \\ \chi(L) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.3.66)$$

que é equivalente ao sistema de equações

$$\begin{cases} a_{11}\phi(0) + a_{12}\chi(0) + a_{13}\phi(L) + a_{14}\chi(L) = 0 \\ a_{21}\phi(0) + a_{22}\chi(0) + a_{23}\phi(L) + a_{24}\chi(L) = 0 \end{cases} \quad (3.3.67)$$

Na notação do esquema, é utilizada a representação em que  $\alpha = \sigma_2$ . Através das condições de contorno obtidas pela interpretação da corrente dada pela Eq. (3.2.49) utilizando a representação em que  $\alpha = \sigma_2$  é possível chegarmos as condições de contorno da forma

$$\begin{pmatrix} \phi_0 - i\chi_0 \\ \phi_L + i\chi_L \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \phi_0 + i\chi_0 \\ \phi_L - i\chi_L \end{pmatrix} \quad (3.3.68)$$

onde utilizamos a parametrização da matriz unitária  $U$  da forma dada pela Eq. (3.2.55)

Rearranjando os termos na Eq. (3.3.68) obtemos

$$\begin{cases} (\rho e^{i(\theta+\varphi)} - 1)\phi(0) + i(\rho e^{i(\theta+\varphi)} + 1)\chi(0) + \kappa e^{i(\theta+\eta)}\phi(L) - i\kappa e^{i(\theta+\eta)}\chi(L) = 0 \\ -\kappa e^{i(\theta-\eta)}\phi(0) - i\kappa e^{i(\theta-\eta)}\chi(0) + (\rho e^{i(\theta-\varphi)} - 1)\phi(L) - i(1 + \rho e^{i(\theta-\varphi)})\chi(L) = 0 \end{cases} \quad (3.3.69)$$

Comparando a Eq. (3.3.67) com a Eq. (3.3.69), encontramos as seguintes relações entre os coeficientes

$$\begin{cases} a_{11} = (\rho e^{i(\theta+\varphi)} - 1), \quad a_{12} = i(\rho e^{i(\theta+\varphi)} + 1), \quad a_{13} = \kappa e^{i(\theta+\eta)}, \quad a_{14} = -i\kappa e^{i(\theta+\eta)}, \\ a_{21} = -\kappa e^{i(\theta-\eta)}, \quad a_{22} = -i\kappa e^{i(\theta-\eta)}, \quad a_{23} = (\rho e^{i(\theta-\varphi)} - 1), \quad a_{24} = -i(1 + \rho e^{i(\theta-\varphi)}). \end{cases} \quad (3.3.70)$$

O espectro e as autofunções do problema foi obtido e resta verificar a condição (3.3.64), ou seja calcular a quantidade  $(J_{14} + J_{32})^2 + (J_{13} + J_{42})^2$  e verificar se ela é diferente de zero, onde  $J_{\alpha\beta} = a_{1\alpha}a_{2\beta} - a_{2\alpha}a_{1\beta}$ . Explicitamente temos

$$\begin{aligned} J_{14} &= a_{11}a_{24} - a_{21}a_{14} = i(1 - e^{2i\theta} - 2i\rho e^{i\theta} \sin \varphi), \quad J_{32} = a_{13}a_{22} - a_{23}a_{12} = i(1 - e^{2i\theta} + 2i\rho e^{i\theta} \sin \varphi) \\ J_{13} &= a_{11}a_{23} - a_{21}a_{13} = 1 + e^{2i\theta} - 2\rho e^{i\theta} \cos \varphi, \quad J_{42} = a_{14}a_{22} - a_{24}a_{12} = 1 + e^{2i\theta} + 2\rho e^{i\theta} \cos \varphi \end{aligned} \quad (3.3.71)$$

segue que

$$(J_{14} + J_{32})^2 + (J_{13} + J_{42})^2 = -4(1 - e^{2i\theta})^2 + 4(1 + e^{2i\theta})^2 = 16e^{2i\theta} \neq 0. \quad (3.3.72)$$

Assim, as condições de contorno do problema satisfazem a condição (3.3.72) e pelo esquema de prova podemos concluir que o conjunto de autofunções  $\{\psi_n, \psi_q\}, n = 1, 2, 3, \dots$  expressos respectivamente pelas Eqs. (3.3.21), (3.3.22), é completo no espaço de Hilbert  $\mathcal{H} = L^2(0, L) \oplus L^2(0, L)$ .

# Capítulo 4

## Conclusão

Dado o exposto, foi demonstrada a necessidade da construção de operadores auto-adjuntos na teoria quântica, em particular de forma crucial para resolver problemas sobre o efeito de Aharonov-Bohm e campo magnético-solenoidal, e o movimento da partícula de Dirac em um campo Coulombiano. Utilizando a teoria de von Neumann determinamos explicitamente os subespaços e índices de deficiência e mostramos a existência de uma família quadri-paramétrica de extensões auto-adjuntos do hamiltoniano de Dirac no intervalo finito. Foi construída a família de hamiltonianos de Dirac auto-adjuntos com o uso do formalismo AIM, e descrevemos os domínios de todas as extensões auto-adjuntas. Para todos os membros da família foi encontrada a relação para a determinação do espectro de energia e as autofunções na forma explícita, e encontramos casos particulares conhecidos na literatura, tais como condições de contorno MIT, entre outros. Com relação a determinados membros da família foi demonstrada a existência de estados com energia menor que a energia de repouso e foi analisado o comportamento de partículas nesses estados e analisada a densidade de probabilidade mostrando a existência de "edge states". Foi provada a ortogonalidade das autofunções através do cálculo direto, mostrando a importância das relações relativísticas e da equação do espectro para obter o resultado. Por fim, foi apresentado o esquema de prova da completeza dos conjuntos das autofunções para os membros da família .



# Referências Bibliográficas

- [1] A. Messiah, Quantum Mechanics Vol I, Interscience Publishers, (1961).
- [2] J. von Neumann, Mathematical Foundations of Quantum Mechanics, Princeton University Press, (1996).
- [3] N. A. Lemos, Convite à Física Matemática, Livraria da Física, (2013).
- [4] S. P. Alliluev, The problem of collapse to the center in quantum mechanics, Sov. Phys. JETP 34, 8–13, (1972).
- [5] M. Bawin, S. A. Coon, Singular inverse square potential, limit cycles and self-adjoint extensions, Phys. Rev. A 67(5) 042712, (2003).
- [6] H. Narnhofer, Quantum theory for  $1/r^2$  potentials, Acta Phys. Aust. 40, 306–322, (1974).
- [7] D. M. Gitman, B. L. Voronov, I. V. Tyutin, Self-adjoint extensions in Quantum Mechanics, Birkhäuser, New York, (2012).
- [8] O. Bayrak, I. Boztosun, H. Ciftci, Exact analytical solutions to the Kratzer potential by the asymptotic iteration method, Int. J. Quantum Chem. 107, 540–544, (2007).
- [9] N. F. Mott, H. S. W. Massey, Theory of Atomic Collisions. Oxford University Press, Oxford, (1933).
- [10] C. J. Ballhausen, M. Gajhede, The tunnel effect and scattering by a negative Kratzer potential, Chem. Phys. Lett. 165(5) 449–452, (1990).
- [11] G. Poschl, E. Teller, Bemerkungen zur Quantenmechanik des Anharmonischen Oszillators, Z. Phys. 83(3–4) 143–151, (1933).

- [12] N. Rosen, P. M. Morse, On the vibrations of polyatomic molecules, *Phys. Rev.* 42, 210–215, (1932).
- [13] C. Eckart, The penetration of a potential barrier by electrons, *Phys. Rev.* 35, 1303–1309, (1930).
- [14] H. A. Bethe, E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Systems*, Encyclopedia of Physics, vol. XXXV/1, Springer, Berlin, (1957).
- [15] A. I. Akhiezer, V. B. Berestetskii, *Quantum Electrodynamics*, Interscience Publishers, New York, (1965).
- [16] P. A. M. Dirac, The Quantum Theory of the Electron, *Proc. Roy. Soc. Lond. , A* 117, 610–624, (1928).
- [17] M. E. Rose, *Relativistic Electron Theory*, Wiley, New York, (1961).
- [18] D. M. Gitman, B. L. Voronov, I.V. Tyutin, The Dirac Hamiltonian with a superstrong Coulomb field. *Theor. Math. Phys.* 150(1) 34–72 (2007).
- [19] J. Hamilton, *Aharonov–Bohm and Other Cyclic Phenomena*, Springer Tracts in Modern Physics, Springer, New York, (1997).
- [20] S. Olariu, I. I Popescu, The quantum effects of electromagnetic fluxes, *Rev. Mod. Phys.* 57, 339–436, (1985).
- [21] M. Peshkin , A. Tonomura, *The Aharonov–Bohm Effect*, Lecture Notes in Physics, Springer, New York, (1989).
- [22] S. P. Gavrilov, D. M. Gitman, A. A. Smirnov, Dirac equation in the magnetic-solenoid field, *Euro. Phys. J. C* 30, 009 (2003), 32(Suppl.) 119–142 , (2003).
- [23] S. P. Gavrilov, D. M. Gitman, A. A. Smirnov, Self-adjoint extensions of Dirac Hamiltonian in magnetic-solenoid field and related exact solutions, *Phys. Rev. A* 67(4) 024103, (2003).
- [24] S. P. Gavrilov, D. M. Gitman, A. A. Smirnov, Green functions of the Dirac equation with magnetic-solenoid field, *J. Math. Phys.* 45 1873–1886, (2004).

- [25] S. P. Gavrilov, D. M. Gitman, A. A. Smirnov, B. L. Voronov, Dirac fermions in a magnetic solenoid field In: Benton, C.V. (ed.) Focus on Mathematical Physics Research, pp. 131–168, Nova Science Publishers, New York, (2004).
- [26] D. M. Gitman, B. L. Voronov, I.V. Tyutin, A. Smirnov, Self-adjoint Schrödinger and Dirac operators with Aharonov–Bohm and magnetic-solenoid fields. Phys. Scr. 85 (2012)
- [27] A. Smirnov, Partícula de Dirac em um campo Magnético-Solenoidal, Novas Edições Brasileiras, (2016).
- [28] P. Exner, P. Stovicek, P. Vytras, Generalized boundary conditions for the Aharonov–Bohm effect combined with a homogeneous magnetic field, J. Math. Phys. 43, 2151–2168, (2002).
- [29] O. Lisovyy, Aharonov–Bohm effect on the Poincare disk, J. Math. Phys. 48 052112-17, (2007). doi:10.1063/1.2738751
- [30] Y. Nambu, The Aharonov–Bohm problem revisited, Nucl. Phys. B 579, 590–616, (2000); M. Hirokawa, O. Ogurusu, Ground state of a spin-1/2 charged particle in a two-dimensional magnetic field, J. Math. Phys. 42, 3334–3343, (2001).
- [31] V. Alonso, S. D. Vincenzo, General boundary conditions for a Dirac particle in a box and their non-relativistic limits, J.Phys. A: Math. Gen. 30 (1997).
- [32] N. I. Akhiezer, I. M. Glazman, Theory of linear operators in Hilbert space, Dover Publications, (1993).
- [33] M. A. Naimark, Linear differential operators, Frederick Ungar, (1967).
- [34] M. Reed, B. Simon, Methods of mathematical physics. Fourier analysis, self-adjointness, Academic Press, (1975).
- [35] B. M. Levitan, Eigenfunction Expansions Associated with Second-order Differential Equations, Gostechizdat, Russia, (1950).
- [36] E. C. Titchmarsh, Eigenfunction Expansions Associated with Second-order Differential Equations, Clarendon Press, Oxford, (1946).

- [37] E. C. Titchmarsh, *Eigenfunction Expansions Associated with Second-order Differential Equations Part II* , Clarendon Press, Oxford, (1958).
- [38] M. Asorey, A. Ibort, G. Marmo, Global theory of quantum boundary conditions and topology change, *Int. J. Mod. Phys. A* 20, 1001-1026, (2005).
- [39] M. Asorey, A.P. Balachandran, J.M. Pérez-Pardo, Edge states: topological insulators, superconductors and QCD chiral bags, *J.H.E.Physics*, (2013).
- [40] V. A. Marchenko, *Sturm-Liouville Operators and Applications*, Revised Edition, AMS, (2011).
- [41] M. Reed, B. Simon. *Methods of modern mathematical physics I: Functional Analysis*, Academic Press, San Diego, USA, (1981).
- [42] M. Reed, B. Simon. *Methods of modern mathematical physics II: Fourier transform and self-adjointness* , Academic Press, San Diego, USA, (1975).
- [43] A. Smirnov, A. Jorge, Representações da Equação de Dirac em 1+1 Dimensões, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 38, nº 3, e3312, (2016).
- [44] P. M. Morse, Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels, *Phys. Rev.* 34, 57–64 (1929).
- [45] G. Bonneau, J. Faraut, G. Valent, Selfadjoint extensions of operators and the teaching of quantum mechanics, *Am. J. Phys.* 69, 322, (2001); arxiv: quant-ph/0103153.
- [46] V. John, G. Jungman, S. Vaidya, The renormalization group and quantum edge states, *Nuclear Phys. B* 455(3), (1995).
- [47] B. Richard, C. B. Gabriel, *Equações Diferenciais: Coleção Schaum*, McGraw-Hill, (2000).

- [48] P. M. Morse, J. B. Fisk, L. I. Schiff, Collision of neutron and proton, *Phys. Rev.* 50, 748–754, (1936).
- [49] A. M. Perelomov, V. S. Popov, Fall to the center in quantum mechanics, *Theor. Math. Phys.* 4, 664–677, (1970).
- [50] H. van Haeringen, Bound states for  $r^{-2}$  potentials in one and three dimensions, *J. Math. Phys.* 19, 2171–2179, (1978).
- [51] E. Fues, Das Eigenschwingungs spektrum zweiatomiger molekule in der Undulationsmechanik, *Ann. Phys.* 80, 376–396, (1926).
- [52] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, Pergamon Press, Oxford, (1977).
- [53] D. M. Gitman, A. D. Levin, I. V. Tyutin, B. L. Voronov, Electronic Structure of Superheavy Atoms, Revisited, *arXiv:1112.2648*, quant-ph, (2012).
- [54] K. Johnson, The M.I.T. bag model, *Acta Physics Polonica*, B6:865–892, (1975).
- [55] M. Bordag, G. L. Klimchitskaya, U. Mohideen, V. M. Mostepanenko, *Advances in the Casimir Effect*, International Series of Monographs on Physics 145, Oxford Science Publications, (2009).